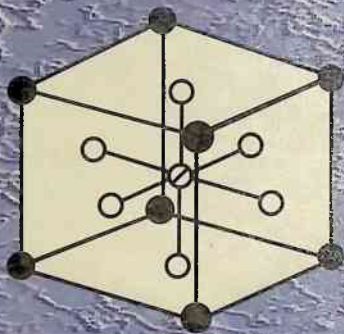


А. ТЕШАБОВ, С. ЗАЙНОБИДДИНОВ,
Ш. ЭРМАТОВ

ҚАТТИҚ ЖИСМ ФИЗИКАСИ



"МОЛИЯ"

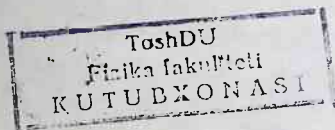
ЎЗБЕКИСТОН RESPUBLIKASI OЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС
ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

Узб 2
539
Т-41

А. ТЕШАБОВЕВ, С. ЗАЙНОВИДДИНОВ, Ш. ЭРМАТОВ

ҚАТТИҚ ЖИСМ ФИЗИКАСИ

*Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги
томонидан ўқув қўлланма сифатида тавсия этилган*



ТОШКЕНТ — «МОЛИЯ» — 2001

А. Тешабоев, С. Зайнобиддинов, Ш. Эрматов. Қаттиқ жисм физикаси. Тошкент, «Молия» нашриёти, 2001 йил. 324 б.

Ушбу ўқув қўлланмада қаттиқ жисмлар физикасининг асосий бўлимлари ҳақида маълумотлар келтирилган. Қаттиқ жисмларнинг айрим хоссалари бўйича турлари, ҳозирги замон қаттиқ жисм квант физикаси асосий тасавурлари заминида металлар, ярим ўтказгичлар, диэлектрикларнинг иссиқлик, механик, электрик, магнитик хоссалари баён қилинган. Бундан ташқари, ҳозир фан ва техникада катта аҳамият касб этаётган қаттиқ материаллар — керамика, мартенситлар, композитлар хоссалари ва қўлланиши тўғрисида ҳам маълумотлар берилган. Ўтилган мавзуларни мустаҳкамлаш мақсадида ҳар бобнинг охирида назорат учун саволлар, шу бобга тегишли масалалар жойлаштирилган. Қўлланмада келтирилган расмлар, жадваллар, кўшимчалар унинг матнини тўлдирди. Ўқув қўлланма олий ўқув юрталарининг тегишли касблар бўйича мутахассислашаётган бакалавр, магистр талабалари, тадқиқотчилар, аспирантлар ва ўқитувчилар учун мулжалланган.

Масъул муҳаррир *Э. З. Имамов*, физика-математика фанлари доктори, профессор

Тақризчилар: *А. Т. Мамадолимов*, физика-математика фанлари доктори, профессор, ЎзР ФА академиги.

М. С. Баҳодирхонов, физика-математика фанлари доктори, профессор.

Ўзбекистон Республикаси Давлат Фан Техника қўмитасининг инновация лойиҳаси асосида ҳамда ЎзР ДФТҚ, Олий ва ўрта махсус мактаб муаммолари институти, Андижон Давлат университети ҳампийлигида нашр этилди.

© Ўзбекистон Республикаси Банк-молия академияси «Молия» нашриёти, 2001 й.

СЎЗ БОШИ

Маълумки, ўзбек тилида қаттиқ жисм физикасидан ўқув қўлланма (дарслик) йўқ. Ваҳоланки, университетлар ва техник ўқув юртларида бу фан умумий ва махсус фан сифатида ўқитилади. Бинобарин, кўп минглаб талабалар, ўқитувчилар, тадқиқотчи, аспирантларга ана шундай ўқув қўлланма жуда керак. Шу эҳтиёжларни ҳисобга олиб, мазкур фанни ўқитиш тажрибасига таяниб, ушбу «Қаттиқ жисм физикаси» ўқув қўлланмаси ёзилди. Бу китобнинг мундарижасини тузишда Олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги томонидан тасдиқланган «Қаттиқ жисм физикаси» фани дастурини («Университет таълими учун физика ва астрономия мутахассисликлари бўйича ўқув дастурлари», Тошкент, «Университет», 1996 й., 90-92-бет) асос қилиб олинди. Қўлланма асосан «Бакалавр» ихтисослигига мўлжалланган бўлсада, ундан «магистр» ихтисослиги талабалари ҳам фойдаланиши мумкин. Ушбу қўлланмада қаттиқ жисмлар турлари, кристал қаттиқ жисмлар ҳақида маълумот, физик статистика асосларининг қисқача баёни берилди. Кристалл панжараси тебранишлари анча батафсил қараб чиқилди. Кристалл қаттиқ жисмларда иссиқлик ҳодисаларига муносиб ўрин ажратилди. Қўлланманинг муҳим қисмини идеал кристал қаттиқ жисмларда электронларнинг энергетик спектри назарияси (зоналар назарияси), ҳақиқий кристаллардаги нуқсонлар физикаси баёни ташкил этади. Суюқ кристаллар ва аморф қаттиқ жисмлар ҳақида қисқача маълумот бериш лозим деб топилди. Кейинги вақтда микроэлектрониканинг жадал ривожланиши туфайли қаттиқ жисмлар сиртида юз берадиган ҳодисалар, хусусан, сиртнинг ҳолати масалалари муҳим аҳамиятга эга бўлиб бормоқда. Шунинг учун бу масалаларга ҳам муносиб жой ажратилди. Қаттиқ жисмларнинг механик хоссалари ва уларга деформациялар таъсирига ҳам эътибор берилди. Қаттиқ жисмда содир бўладиган ҳажмий ўзгаришларнинг энг муҳимлари қараб чиқилди. Қаттиқ жисмларнинг асосий турлари бўлиши металллар, ярим ўтказгичлар,

диэлектрикларга алоҳида боблар бағишланди. Тадқиқланиши ва қўлланиши тобора кенгай бораётган керамик қаттиқ жисмлар ва композицион моддалар ҳақида маълумотни қўлланмага киритишни зарур деб ҳисобладик. Қаттиқ жисмларда юз берадиган кинетик ҳодисалар, моддалар, асбоблар хоссаларини назарий ўрганиш ва амалий қўлланишда катта аҳамиятли бўлгани учун улар тўғрисида асосий маълумотлар баён қилинди. Ҳар бир боб охирида назорат учун саволлар ва масалалар жойланди. Қўлланма охирида зарурий қўшимчалар, жадваллар келтирилди, фойдаланилган ва тавсия қилинадиган адабиёт рўйхати берилди. Алоҳида таъкидлаш керакки, узоқ йиллик ҳамкоримиз Москвалик профессор В. И. Фистулнинг икки жилдли «Физика и химия твердого тела» (М., «Металлургия», 1995 г.) дарслигидаги бир қатор керакли маълумотлардан фойдаландик. Ундан кўп миннатдоримиз. Қўлланманинг тегишли жойларида керакли чизмалар, чизмалар, диаграммалар, жадваллар каби матнни яққоллаштирувчи материаллардан фойдаланилди. II-VIII бобларни профессор А. Тешабоев, XI, XII, XIII, XIV бобларни профессор С. Заїнобиддинов, I, IX, X, бобларни фан номзоди Ш. А. Эрматов ёзган.

Қўлланмани эътибор билан ўқиб чиқиб, ўз қимматли фикр-мулоҳазаларини айтган тақризчилар: академик А. Т. Мамадолимовга ва профессор М. С. Баҳодирхоновга миннатдорчилигимизни билдирамиз.

Қўлланмани нашрга тайёрлашда дастурчилар В. В. Ларкин ва Ш. Б. Баҳритдиновларнинг хизматлари ҳам катта бўлганини мамнунлик билан таъкидлаймиз.

Албатта, ўзбек тилида ёзилган ва нашр қилинаётган ушбу ўқув қўлланмада камчиликлар учраши табиий, улар ҳақида ўз фикрларини нашриётга ёзиб юборган ўқувчилардан миннатдор бўлардик.

Муаллифлар

1 БОБ

ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРНИНГ ТУЗИЛИШИ ВА ТУРЛАРИ

Табиатдаги моддалар газ, суюқлик, қаттиқ жисм ва плазма ҳолатларида бўлади. Бу ҳолатлар модданинг агрегат ҳолатлари деб аталиб, бир-биридан физик хоссалари билан фарқ қиладилар. Қаттиқ жисмларнинг суюқлик ва газлардан фарқи шундаки, улар ўз шаклларини сақлайди ва уларда оқувчанлик кузатилмайди. Микроскопик нуқтаи назардан бундай фарқнинг бўлиши, моддани ташкил этувчи атом ва молекулалар орасидаги ўзаро таъсир энергиясининг катта ёки кичиклиги билан тушунтирилади. Суюқлик ва газларда уларни ташкил қилувчи атом ва молекулалар орасидаги ўзаро таъсирлашиш энергияси уларнинг иссиқлик ҳаракати энергиясидан кичик бўлади. Шунинг учун суюқлик ёки газни ташкил этувчи атом ва молекулалар бир нуқтадан иккинчи нуқтага кўчиб юриши мумкин, яъни оқувчанлик хоссасига эга. Қаттиқ жисмларда эса молекула ёки атомлар орасидаги таъсирлашув энергияси уларнинг иссиқлик ҳаракати энергиясидан анча катта бўлади, шунинг учун улар эркин кўчиб юра олмайди ва мувозанат вазиятлари атрофида тебранма ҳаракат қилиб туради. Демак, қаттиқ жисмни бошқа агрегат ҳолатлардан ажратиб турувчи асосий фарқлари: биринчидан, унинг нормал шароитда ўз шаклини сақлаши; иккинчидан, уларни ташкил этувчи атом молекулаларнинг тебранма ҳаракатда бўлишидир.

Қаттиқ жисмлар тузилишига кўра аморф, кристалл, шишасимон ва полимер қаттиқ жисмларга бўлинади. Бундан ташқари қаттиқ жисмлар уни ташкил қилувчи атом ёки молекулаларнинг ўзаро боғланишига кўра ҳам фарқланади (1.1-чизма).



1.1-чизма

1.1. Кристалл қаттиқ жисмлар

Кристалл қаттиқ жисмларда уларни ташкил қилувчи атом ва молекулалар қатъий тартиб билан жойлашади. Агар бу тартиб икки қўшни атом ёки молекула орасидаги масофадан бир қанча марта катта бўлган масофаларгача сақланса уни узоқ тартиб деб аталади. Кристаллар аниқ суюлиш температурасига (нуқтасига) эга бўлади. Жисм бу температурагача қиздирилганда атомлар ва молекулалар жойлашишида тартиб йўқолади ва улар оқувчанликка эга бўлиб қолади. Суюлиш нуқтасида ташқаридан олинаётган иссиқлик таъсирида жисм температураси ўзгармайди ва қаттиқ жисм тўла суюқликка айлангунча температура сақланади.

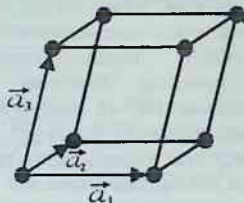
Кристаллдаги атомлар ва молекулаларнинг жойлашиш тартиби бутун кристалл бўйича сақланган бўлса, бундай кристалл *монокристалл* деб аталади. Ҳамма монокристаллар *анизотропияга* эга, яъни уларнинг физик хоссалари турли йўналишларда турличадир. Монокристалларнинг макроскопик бўлакчаларининг тартибсиз бирикишидан ҳосил бўлган кристалл *поликристалл* деб аталади. Поликристаллаги монокристалл доналарнинг тартибсиз жойлашуви натижасида унинг физик хоссалари барча йўналишлар бўйича бир хил бўлади. Бундай жисмлар *изотроп жисмлар* деб аталади. Кристалллардан тузилиши ва хоссалари жиҳатидан фарқ қиладиган аморф қаттиқ жисмлар VII бобда қаралади.

1.2. Кристалл панжараси

Кристални ташкил қилувчи зарралар мувозанат нуқталари атрофида тебранма ҳаракатда бўлади. Ушбу мувозанат нуқталарини фикран бирлаштирсак *кристалл панжараси* ҳосил бўлади. Мувозанат нуқталари эса *кристалл панжараси тугунлари* деб аталади.

Кристалл тузилишга эга бўлган жисмларни тавсифлашда юқорида келтирилган кристалл панжараси тугунлари тушунчаси муҳим аҳамиятга эгадир.

Кристалл панжарасининг тузилиш қиёфасини сақлаган энг кичик бўлагини элементар каток (элементар ячейка) деб аталади. Одатда элементар каток параллелапипеддан иборат бўлади. Ушбу параллелапипеднинг учта қирраси бўйлаб $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ векторларни йўналтирамыз, бу векторлар узунликлари шу параллелапипед қирраси узунлигига тенг бўлсин. Бундай векторлар асосий (трансляцион) векторлар (ёки даврлар) деб аталади. (1.2-чизма).



1.2-чизма. Элементар каток.

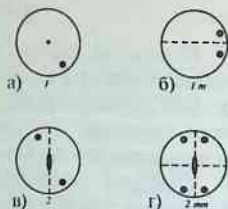
Трансляцион векторларнинг асосий хоссаси шундан иборатки, бу векторлар ёрдамида чексиз кристални $\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ вектор бўйлаб кўчирсак, кристалл ўз-ўзига устма-уст тушади (n_1, n_2, n_3 — бутун сонлар). Кўп ҳолларда бир қанча атомлар бирикмалари кристалл панжарасини ҳосил қилади. Бундай тақорланувчи атомлар гурӯҳини *базис* деб аталади. Ихтиёрий кристалнинг базиси ва трансляцион векторлари аниқланган бўлса кристалл панжараси аниқланган ҳисобланади.

1.3. Кристалларда симметрия

Симметрия деганда биз жисмнинг устида маълум бир амалларни (буриш, силжитиш, акслантириш) бажарганимизда жисм ўз-ўзига устма-уст тушиши ва барча йўналишларда физик хоссаларининг аввалгидек ўзгаришсиз қолишини тушунамыз. Мисол тариқасида 1.3-чизмада келтирилган шакллар симметриясини кўриб чиқамиз.

1.3. а- чизмадаги шаклнинг бирор ўққа ёки текисликка нисбатан симметрияси йўқ. Ушбу шакл фақат 360° бурчакка бурилганда ўзи билан ўзи устма-уст тушади. Бундай қуйи симметрияга эга

бўлган жисмларни халқаро белгилашда 1 рақами билан белгиланади ва шакл биринчи тартибли симметрия ўқиға эға дейилади. 1.3.б-чизмадаги шакл эса узук-узук чизиқ билан тасвирланган текисликка нисбатан симметрик бўлади, бундай шакл симметрияси 1m кўринишда ёзилади. 1.3.в-чизмадаги шаклни 180° га маълум бир ўқ атрофида бурганимизда устма-уст тушади, 360° га



1.3-чизма. Шакллар симметрияси

бурганда у икки марта устма-уст тушади, демак, иккинчи тартибли симметрия ўқиға эға — 2. Охирги шаклимиз иккинчи тартибли симметрия ўқиға ва икки симметрия текислигиға эға, яъни — 2mm. Кристаллар ҳам симметрияға эға, уларнинг симметрияси кристалл панжарасининг симметриясидан келиб чиқади. Кристаллар элементар катакнинг ташкил этувчиларини, яъни трансляцион векторларнинг узунлигиға ва улар орасидаги бурчакларнинг қийматиға қараб 7 та катта гуруҳға бўлинадилар. Бу гуруҳларнинг ҳар бири ўз номиға эға бўлиб, кристалл сингониялари деб аталади (1.1-жадвалға қаранг).

1.1-жадвал

№	Кристалл сингонияси	Элементар катакни тасвирловчи катталиқлар (параметрлар)
1	Триқлин	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$
2	Моноклин	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
3	Ромбик	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
4	Тетрагонал	$a_1 = a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
5	Кубик	$a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
6	Тригонал	$a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$
7	Гексагонал	$a_1 = a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Кристалл учун мумкин бўлган барча симметрия амаллари кристаллнинг симметрия гуруҳини ташкил қилади. Симметрия гуруҳлари ҳам икки тоифаға бўлинади: нуқтавий ва трансляцион. Нуқтаға нисбатан акслантириш (инверсия), ўқ атрофида буриш ва текисликка нисбатан акслантириш билан боғлиқ бўлган симметрия амаллари нуқтавий симметрия гуруҳини ташкил қилади. Кристаллнинг ташқи симметриясини аниқловчи бундай нуқтавий симметрия гуруҳлари сони 32 та бўлиб уларнинг кристалл сингониялари бўйича бўлиниши 1.2-жадвалда келтирилган.

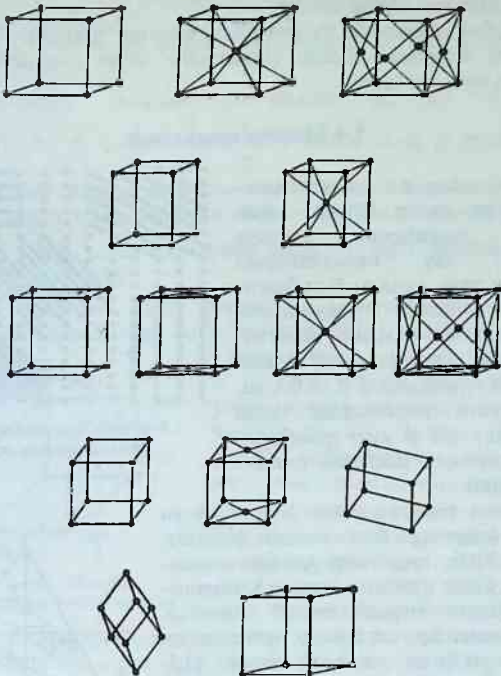
Кристалл симгониялари	Нуқтавий гуруҳининг белгилагиши		Нуқтавий гуруҳ номи
	Халқаро	Шенфлис буйича	
1. Триқлин	$\bar{1}$ $\bar{1}$	C_1 C_1	Моноэдриқ Пинакоидал
2. Моноклин	2 m 2/m	C_2 C_2 C_{2h}	Уқли диэдриқ Ўқсиз диэдриқ Призматик
3. Ромбик	222 mm mmm	D_2 C_{2v} D_{2h}	Ромб-тетраэдриқ Ромб-пирамидал Ромб-дипирамидал
4. Тетрагонал	4 422 4/m 4/mmm 4/mmm $\bar{4}$ $\bar{4} 2m$	C_4 D_4 C_{4h} C_{4v} D_{4h} S_4 D_{2d}	Тетрагонал пирамидал Тетрагонал трапециоэдриқ Тетрагонал дипирамидал Дитетрагонал пирамидал Дитетрагонал дипирамидал Тетрагонал тетраэдриқ Тетрагонал скаленоэдриқ
5. Тригонал	3 32 3m $\bar{3}$ $\bar{3} m$	C_3 D_3 C_{3v} C_{3i} D_{3d}	Тригонал пирамидал Тригонал трапециоэдриқ Дитригонал пирамидал Ромбоэдриқ Дитригонал скаленоэдриқ
6. Гексагонал	$\bar{6}$ 6m2 6 622 6/m 6/mmm 6/mmm	C_{3h} D_{3h} C_6 D_6 C_{6h} C_{6v} D_{6h}	Тригонал дипирамидал Дитригонал дипирамидал пирамидал Гексагонал трапециоэдриқ Гексагонал дипирамидал Дигексагонал пирамидал Дигексагонал дипирами- дал
7. Кубик	23 m $\bar{3}$ $\bar{4} 3m$ 432 m $\bar{3} m$	T T_h T_d O O_h	Тритетраэдриқ Дидодексаэдриқ Гексатетраэдриқ Трионгаэдриқ Гексантиэдриқ

1.2-жадвалда ушбу 32 та нуқтавий симметрия гуруҳларини халқаро қабул қилинган белгиланишидан ташқари, кристаллограф олим Шёнфиллис киритган белгилашлар ҳам келтирилган. Қаттиқ жисмда кристалл панжарасининг мавжудлиги 1,2,3,4, 6-чи тартибли симметрия ўқларидан юқори тартибли симметрия ўқлари бўлмаслигига олиб келади. 5-чи, 7-чи тартибли симметрия ўқи ҳам бўлиши мумкин эмас, чунки беш ва етти бурчакли шакл ёрдамида фазони қолдиқсиз тўлдириб бўлмайди (баъзи бир биологик кристаллар бундан истисно). Бошқа симметрия ўқларини эса юқоридаги симметрия ўқларига келтирилиши мумкин. ҳар бир симметрия гуруҳи асосий ҳосил қилувчи симметрия амаллари билан белгиланади. Кристаллар нуқтавий симметриядан ташқари трансляцион симметрияга ҳам эгадирлар. Кристалл панжарасининг мумкин бўлган 14 хил трансляцион симметрия амали мавжуд. Ҳар бир трансляцион симметрия амалига битта элементар катакни мос қўйиш мумкин. Натижада 14 хил элементар катак ҳосил бўлади, бу элементар катаклар *Браве панжаралари* деб аталади. Трансляцион симметрия — бу кристаллни маълум бир вектор бўйича кўчирганимизда ўзи билан устма-уст тушишидир. Ҳар бир кристаллар сингониясида фақат маълум бир турдаги Браве панжараси бўлиши мумкин.

Кристалл панжарасининг тўлиқ симметриясини фазовий симметрия гуруҳи аниқлайди. Фазовий симметрия гуруҳида кристаллни нуқтавий ва трансляцион симметрия амаллари мужассамлашган бўлади. Ҳаммаси бўлиб 230 та фазовий гуруҳлар мавжуд бўлиб, ҳар қандай кристалл ўз тузилишига кўра ана шу гуруҳларнинг бирига мансуб бўлади. Кристаллнинг фазовий симметрия гуруҳи маълум бўлса, унинг кристалл тузилишини келтириб чиқариш жуда осон, шунинг учун кристаллнинг симметрия гуруҳини билиш муҳим аҳамиятга эга. Ҳозирги пайтда кристалл симметрияси рентген нурлари ёрдамида аниқланади. Фаннинг ушбу йўналиши *кристаллография* деб номланади. 1.3-жадвалдан кўриниб турибдики:

1. *Триклин сингония* панжаралари фақат содда P - шаклдаги панжаралардир. Браве панжарасини ифодаловчи параметрлар со-ни 6 та: уч қирра ва учта бурчак.

2. *Моноклин сингонияда* иккита Браве панжараси шакллари бўлиши мумкин. Улардан бири P — шаклдаги содда катакка эга бўлиб, иккинчиси эса, марказлашган асосли яъни C — шаклдаги катакка эга. Ушбу панжараларни 6 та параметр аниқлайди ($a_1, a_2, a_3, \alpha, \beta, \gamma$)



3. Ромбик сингонияда тўрт хил Браве панжаралари мавжуд бўлиши мумкин; Р — содда, С — марказлашган асосли, ҳажмий марказлашган — I ва ёқий марказлашган — F турдаги панжаралар. Ушбу шаклдаги панжаралар тўртта параметр билан аниқланади. (a_1, a_2, a_3, α)

4. Тетрагонал сингония икки хил, яъни Р ва I шаклдаги панжараларга эга бўлиб учта параметр билан аниқланади. (a_1, a_2, α)

5. Тригонал сингония иккита параметр билан аниқланади (a, α) бу сингонияда фақат Р - шаклдаги Браве панжараси мавжуд.

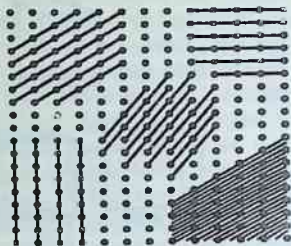
6. Гексагонал сингонияда битта Браве панжараси бўлиб, тўрт параметр билан аниқланади. Ушбу каток С — шаклга мансуб

булиб кўп ҳолларда уни учта P — шаклдаги содда катак кўринишида ҳам ифодаланади.

7. Кубик сингонияда уч хил катак бўлиши мумкин: P , I ва F шаклдаги катаклар. Кубик сингонияни икки параметр билан аниқлаш мумкин (a , α)

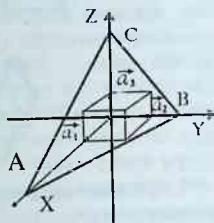
1.4 Миллер индекслари

Кристалларнинг анизотропияси, уларда турли йўналишларда физик хоссаларни турлича бўлиши, шу йўналишларни фарқлаш учун маълум бир белгилашлар зарур эканлигини кўрсатади. 1.4-чизмада кристалл панжараси тасвирланган, ундан кўриниб турибдики $O'O$ ва OA кесиб ўтувчи текисликлар турли йўналишга эга ва улар трансляцион векторларга нисбатан турлича жойлашган.



1.4-чизма. Текисликларнинг Миллер индекслари

Бундай текисликларни фарқлаш учун *Миллер индекслари* белгиларидан фойдаланамиз. Ушбу индекслар қандай топилишини қуйида кўрсатиб ўтамиз. Координаталар ўқини шундай танлаб оламизки, улар элементар катакнинг трансляцион векторлари билан устма-уст тушсин. (1.5-чизма). Бизга (ABC) текислик индексларини топиш керак бўлсин. Унинг учун дастлаб биз текисликни координата \rightarrow ўқлари билан кесишган жойларини



1.5-чизма. Миллер индексларини топишга доир

аниқлаб $m = \frac{OA}{a_1}$, $n = \frac{OB}{a_2}$, $p = \frac{OC}{a_3}$ сонлар-

ни топамиз. Координата ўқларини бир узунлик бирлиги ўша ўқда ётувчи трансляцион вектор узунлигига тенг бўлади. Бундай турли масштабдаги координата ўқларини танлаш, белгилашларни осонлаштиради. (m, n, p) сонлари топилгандан кейин ўша текислик-

нинг Миллер индексини аниқлаш мумкин. Унинг учун (m,n,p) сонларининг тескари нисбатлари ёзилади, яъни

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} \text{ ва шу нисбатга тенг бўлган энг кичик бутун сонлар}$$

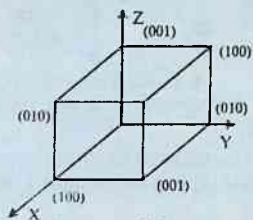
ёзилади, масалан у сонлар h; k; l бўлсин.

$$\text{Демак, } h : k : l = \frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} \text{ У ҳолда (h, k, l) сонлар ABC}$$

текисликнинг *Миллер индекслари* деб аталади. Бир мисол кўриб ўгамиз. Бирор текислик учун m=1, n=1/2, p=1/3 бўлсин, у ҳолда

$$h:k:l = \frac{1}{1} : \frac{1}{1/2} : \frac{1}{1/3} \text{ яъни ушбу текислик учун Миллер текис-}$$

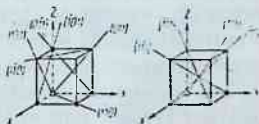
ликлари h=1, k=2, l=3 бўлади ва мазкур текислик (123) кўринишда белгиланади. Агар текислик бирор координата ўқига



1.6-чизма. Миллер индексларининг топши мисоли

параллел бўлса, шу ўққа мос индекс 0 га тенг бўлади. Агар текислик ўқни манфий қисмида кесиб ўтса, ўша ўққа мос индекс манфий бўлади, лекин ишора соннинг олдига эмас тепасига қўйилади. h=-1, k=2, l=2 бўлса, текислик ($\bar{1}22$) кўринишда белгиланади. 1.6-чизмада кубнинг ён текисликларини келтирилган. [(100), (010), (001), (100) ва бошқалар]. Бу текисликлар

эквивалент бўлгани учун уларни бир оилага мансуб текисликлар деб қаралади ва катта қавс билан белгиланади {100}, қаттиқ жисмнинг ушбу йўналишлар бўйича физик хоссалари бир хилдир. Кристалда текисликлардан ташқари, йўналишларни ҳам белгилаш қабул қилинган. Йўналишни белгиловчи индекслар шундай энг кичик бутун u, v, w, сонларки, уларнинг нисбати (u : v : w) шу йўналишда олинган векторнинг координата ўқларидаги проекциялари ўзаро нисбатига тенгдир. Бу ерда ҳам координаталарнинг масштаби бирлиги-трансляцион вектори узунлигига тенг деб олинади. Йўналиш индекслари тўртбурчак қавслар ичига ёзилади. Масалан, [100], [$\bar{1}00$] X



1.7-чизма. Йўналишларнинг Миллер индекслари

— ўқи бўйича мусбат ва манфий йўналишларни билдиради (1.7- чизма). Эквивалент йўналишлар оиласи синиқ қавс билан белгиланади $\langle u, v, w \rangle$ XOY ёқнинг диагонали $[110]$ билан белгиланади. $[111]$ — кубнинг фазовий диагонали. Кубик сингонияда агар $h=u$, $k=v$, $l=w$ бўлса, $[uvw]$ йўналиш (hkl) текисликка перпендикуляр бўлади.

Элементар катакдаги тугун координаталари ҳолатини аниқлаш учун ҳам белгилаш қабул қилинган. Тугунлар трансляцион векторларнинг қанча қисмини ташкил этса, ўша сонлар билан белгиланади.

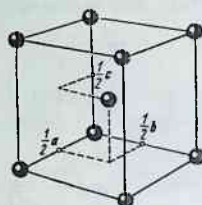
Масалан, 1.8-чизмада келтирилган элементар ячея марказидаги тугун координатаси $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ни ташкил қилади.

Ушбу сонлар қавсиз ёзилади.

Агар тугунлар ён ёқлар марказларида бўлса, (ёқий марказлашган элементар катак) уларнинг координаталари қуйидагича

ёзилади: $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$.

Кристалл тузилишлар тавсифи келтирилган жадвалларда олдин одатда, элементар катак тури ва ўлчамлари берилди, кейин тугунлар координаталари келтирилади.



1.8-чизма. Элементар катакдаги тугунлар вазиятини белгилаш

1.5. Кристалл атомларининг ва молекулаларининг боғланиш турлари

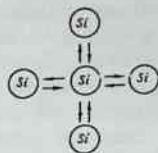
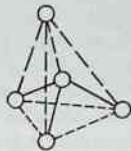
Кристалл панжараси кристалларни фарқлаш, кристаллнинг геометрик тузилиши тўғрисида тасаввур ҳосил қилишга ёрдам беради. Лекин, ушбу билим кристаллдаги атом ёки молекулаларни кристалл панжараси тугунларида тутиб турувчи кучларнинг табиати ҳақида маълумот бера олмайди. Шунинг учун кристалларни уларни ташкил қилувчи атомлар ёки молекулалар орасидаги таъсир кучларига қараб ажратиш ва ўрганиш мақсадга мувофиқ бўлади. 1.1-чизмада атомлар молекулаларининг боғланишига кўра беш турдаги боғланишлар мавжуд эканлиги кўрсатилган. Булар молекуляр, водород, ковалент (атом), ион ва металл боғланишлардир.

1.5.1. Атом боғланишли (ковалент, гомеокүтбий) кристаллар

Атом боғланишли кристаллар тугунларида бирор модданинг атомлари жойлашган бўлади. Атом боғланиш икки қўшни атомлар орасида умумий валент электронлари бўлиши билан тушунтирилади.

Газ ҳолатдаги H_2 , N_2 ва O_2 молекулаларидаги атомлар ҳам

ковалент равишда боғлангандир. Боғланиш ҳосил қилишда ҳар бир атомдан биттадан электрон иштирок этади. Бу электронлар бир атомдан иккинчисига ўтиши ҳам мумкин, шунинг учун бундай боғланиш кучларини алмашиш кучлари, боғланиш энергиясини эса алмашиш энергияси деб аталади. Атом боғланишга кремний кристали мисол бўла олади (1.9-чизма). У олмоссимон кристалл панжарасига эга бўлиб ҳар бир атом атрофида 4 та яқин қўшниси бор. Ушбу атомлар тетраэдр шаклида жойлашган бўлади. Қўшни икки атом орасидаги боғланишни ҳосил қилишда ҳар бир атомдан битта, икки атомдан иккита электрон қатнашади. Ковалент боғларнинг муҳим белгиларидан бири уларнинг тўйинган боғланиш эканлигидир, яъни уларда ҳар бир боғда иккитадан электронлар қатнашади. Иккинчи белгиси шундан иборатки, ковалент боғланишлар қўшни атомлар оралиғи бўйича йўналган бўлади. Буни боғланишнинг йўналтирилганлиги ёки анизотропияси деб аталади. Ковалент боғланиш ҳар хил атомлар орасида ҳам ҳосил бўлиши мумкин (масалан, SiC кремний карбиди, AlN алюминий нитриди ва бошқаларда). Кўп ҳолларда элементлар жадвалининг II, III, IV, V гуруҳ элементлари ковалент боғ ҳосил қиладилар.



1.9-чизма. Кремний кристаллида атомлараро ковалент боғланиш

1.5.2. Ион (гетерокүтбий) боғланишли кристаллар

Бундай кристалларнинг панжараси тугунларида ионлар жойлашган бўлади. Турли ишорали ионлар орасидаги масофа бир хил ишорали ионлар орасидаги масофадан кичик бўлади, шунинг учун турли ишорали ионлар орасидаги тортишнинг кучи бир хил ишорали ионлар орасидаги итариш кучидан каттадир. Лекин тор-

тишиш кучлари маълум бир r_0 масофагача таъсир қилади. Агар ионлар орасидаги масофа r_0 дан кичкина бўлса улар орасида итариш кучи пайдо бўлади. Кристалдаги қўшни атомлар орасидаги тортишиш ва итариш кучлари квант механикаси орқали тушунтирилади. Баъзи масалаларни ечишдагина биз ион боғланишли кристаллардаги ўзаро таъсир кучларини электростатик Кулон кучлари деб олишимиз мумкин. Ион кристаллари кўп ҳолларда элементлар даврий системаси I-чи ва VII гуруҳ элементлари бирикишидан ҳосил бўлади. Ион кристаллининг ҳар бир иони атрофида муайян K сондаги бошқа ионлар жойлашади. Ушбу ионлар сонини координацион сон — K деб аталади. Координацион соннинг қиймати панжарадаги ионларнинг радиуслари нисбати билан аниқланади. Ушбу сонни қандай аниқлаш 1.4-жадвалда келтирилган. Бу ерда $\frac{r_A}{r_B}$ - ионларнинг радиуслари нисбати.

1.4-жадвал

Координацион сон	12	8	6	4	2
$\frac{r_A}{r_B}$ ион қиймати	$\frac{r_A}{r_B} = 1$	$1 > \frac{r_A}{r_B} > 0,73$	$0,73 > \frac{r_A}{r_B} > 0,41$	$0,41 > \frac{r_A}{r_B} > 0,22$	$\frac{r_A}{r_B} < 0,22$

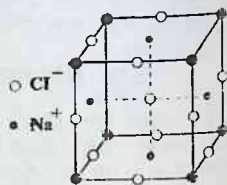
Мисол тариқасида ош тузи (NaCl) кристали тузилишини

кўриб чиқамиз. Na атомининг эффектив радиуси $r_{\text{Na}} = 0,98 \text{ \AA}$,

хлор атоминики эса $r_{\text{Cl}} = 1,81 \text{ \AA}$, демак $\frac{r_A}{r_B} = 0,98/1,81 = 0,54$.

Юқоридаги жадвалдан ушбу кристал учун координацион сон $K=6$ эканлигини аниқлаймиз. Бу кристалдаги ҳар бир ионни атрофида 6 та ион ўраб туришини англатади. (1.10-чизма).

Дарҳақиқат, ош тузи кристали содда кубик тузилишга эгадир. Кристалл тузилиш кўп жиҳатдан кристалдаги ионларнинг эффектив радиуслари нисбати га боғлиқ. NaCl кристаллида хлор иони радиуси натрий иони радиусидан деярли икки баробар катта, шунинг учун уларнинг ўрасига яна бир ионни жой-



1.10-чизма. Ион боғланишли NaCl кристали

лашиши учун бўш жой қолмайди. Нагижала ушбу ионлар содда кубик шаклда жойлашадилар. Ион кристалларида ўзаро боғланиш энергияси асосан электростатик тавсифга эга бўлиб, бу энергияни *Маделунг энергияси* деб ҳам аталади. Кристалдаги ихтиёрий *i* ва *j* номерли атомлар орасидаги боғланиш энергиясини U_{ij} деб атайлик. У ҳолда *i* номерли ионнинг бошқа ҳамма атомлар билан таъсирлашув энергияси $U = \sum_j U_{ij}$ га тенг бўлади ($j \neq i$). Ион

боғланиш кристалл учун икки қисмдан иборат деб қараш мумкин:

$$U_{ij} = \lambda \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right) \pm \frac{q^2}{r_{ij}} \quad (1.1) \text{ (СГС да)}$$

Ифоданинг биринчи ҳади ионга таъсир қилаётган итарувчи кучнинг потенциали бўлиб, иккинчи ҳади эса Кулон таъсири потенциалидан иборатдир. Қўшни атомлар орасидаги масофани *R* деб оламиз ва белгилаш киритамиз $r_{ij} = p_{ij}R$. Ўзаро итариш кучлари фақат яқин жойлашган атомлар орасидагина мавжуд деб олсак, у ҳолда юқоридаги ифода соддалашади.

$$U_{ij} = \begin{cases} \lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - \left(\frac{q^2}{R}\right) & \text{- яқин атомлар учун,} \\ \pm \frac{1}{p_{ij}} \cdot \frac{q^2}{R} & \text{- қолган барча атомлар учун.} \end{cases} \quad (1.2)$$

Кристалдаги мусбат ва манфий ионлар сони $2N$ га тенг бўлса, кристалнинг тўлиқ энергияси $U_T = NU_i$ га тенг бўлади. U_i ни *N* га кўпайтиришимиз сабаби Ҳар бир таъсирлашувчи жуфтни бир марта ҳисобга олилади. Юқоридаги ифодадан U_i ни топамиз:

$$U_i = Z \left[\lambda \exp(-R/\rho) - \frac{q^2}{R} \right] + \sum_j^{N-Z} \pm \left(\frac{1}{p_{ij}} \right) \cdot \frac{q^2}{R} \quad (1.3)$$

Ушбу формулада *Z* энг яқин қўшни атомлар сони. Ифодани соддалаштириш учун $Z \frac{q^2}{R}$ ни иккинчи ҳадга қўшиб қуйидагини ҳосил қиламиз:

$$U_i = Z \lambda \exp(-R/\rho) - \sum_j^N \left(\pm \frac{1}{p_{ij}} \right) \cdot \frac{q^2}{R} \quad (1.4)$$

тишиш кучлари маълум бир r_0 масофагача таъсир қилади. Агар ионлар орасидаги масофа r_0 дан кичкина бўлса улар орасида итариш кучи пайдо бўлади. Кристалдаги қўшни атомлар орасидаги тортишиш ва итариш кучлари квант механикаси орқали тушунтирилади. Баъзи масалаларни ечишдагина биз ион боғланишли кристаллардаги ўзаро таъсир кучларини электростатик Кулон кучлари деб олишимиз мумкин. Ион кристаллари қўп ҳолларда элементлар даврий системаси I-чи ва VII гуруҳ элементлари бирикишидан ҳосил бўлади. Ион кристаллининг ҳар бир иони атрофида муайян К сондаги бошқа ионлар жойлашади. Ушбу ионлар сонини координацион сон — К деб аталади. Координацион соннинг қиймати панжарадаги ионларнинг радиуслари нисбати билан аниқланади. Ушбу сонни қандай аниқлаш 1.4-жадвалда келтирилган. Бу ерда $\frac{r_A}{r_B}$ - ионларнинг радиуслари нисбати.

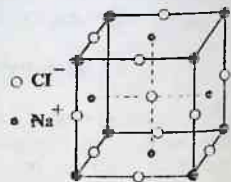
1.4-жадвал

Координацион сон	12	8	6	4	2
$\frac{r_A}{r_B}$ нинг қийматлари	$\frac{r_A}{r_B} = 1$	$1 > \frac{r_A}{r_B} > 0,73$	$0,73 > \frac{r_A}{r_B} > 0,41$	$0,41 > \frac{r_A}{r_B} > 0,22$	$\frac{r_A}{r_B} < 0,22$

Мисол тариқасида ош тузи (NaCl) кристали тузилишини кўриб чиқамиз. Na атомининг эффектив радиуси $r_{Na} = 0,98 \text{ \AA}$, хлор атоминики эса $r_{Cl} = 1,81 \text{ \AA}$, демак $\frac{r_A}{r_B} = 0,98/1,81 = 0,54$.

Юқоридаги жадвалдан ушбу кристал учун координацион сон $K=6$ эканлигини аниқлаймиз. Бу кристалдаги ҳар бир ионни атрофида 6 та ион ўраб туришини англатади. (1.10-чизма).

Дарҳақиқат, ош тузи кристали содда кубик тузилишга эгадир. Кристалл тузилиш қўп жиҳатдан кристалдаги ионларнинг эффектив радиуслари нисбати-га боғлиқ. NaCl кристаллида хлор иони радиуси натрий иони радиусидан деярли икки баробар катта, шунинг учун уларнинг ўртасига яна бир ионни жой-



1.10-чизма. Ион боғланишли NaCl кристали

лашиши учун бўш жой қолмайди. Натижада ушбу ионлар содда кубик шаклда жойлашадилар. Ион кристалларида ўзаро боғланиш энергияси асосан электростатик тавсифга эга бўлиб, бу энергияни *Мделунг энергияси* деб ҳам аталади. Кристалдаги ихтиёрий *i* ва *j* номерли атомлар орасидаги боғланиш энергиясини U_{ij} деб атайлик. У ҳолда *i* номерли ионнинг бошқа ҳамма атомлар билан таъсирлашув энергияси $U = \sum_j U_{ij}$ га тенг бўлади ($j \neq i$). Ион

боғланиш кристалл учун икки қисмдан иборат деб қараш мумкин:

$$U_{ij} = \lambda \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right) \pm \frac{q^2}{r_{ij}} \quad (1.1) \text{ (СГС да)}$$

Ифоданинг биринчи ҳади ионга таъсир қилаётган итарувчи кучнинг потенциали бўлиб, иккинчи ҳади эса Кулон таъсири потенциалидан иборатдир. Қўшни атомлар орасидаги масофани R деб оламыз ва белгилаш киритамиз $r_{ij} = P_{ij}R$. Ўзаро итариш кучлари фақат яқин жойлашган атомлар орасидагина мавжуд деб олсак, у ҳолда юқоридаги ифода соддалашади.

$$U_{ij} = \begin{cases} \lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - \left(\frac{q^2}{R}\right) & \text{- яқин атомлар учун,} \\ \pm \frac{1}{P_{ij}} \cdot \frac{q^2}{R} & \text{- қолган барча атомлар учун.} \end{cases} \quad (1.2)$$

Кристалдаги мусбат ва манфий ионлар сони $2N$ га тенг бўлса, кристалнинг тўлиқ энергияси $U_T = NU_i$ га тенг бўлади. U_i ни N га кўпайтиришимиз сабаби Ҳар бир таъсирлашувчи жуфтни бир марта ҳисобга олинади. Юқоридаги ифодадан U_i ни топамиз:

$$U_i = Z \left[\lambda \exp(-R/\rho) - \frac{q^2}{R} \right] + \sum_j^{N-Z} \pm \left(\frac{1}{P_{ij}} \right) \cdot \frac{q^2}{R} \quad (1.3)$$

Ушбу формулада Z энг яқин қўшни атомлар сони. Ифодани соддалаштириш учун $Z \frac{q^2}{R}$ ни иккинчи ҳадга қўшиб қуйидагини ҳосил қиламыз:

$$U_i = Z \lambda \exp(-R/\rho) - \sum_j \left(\pm \frac{1}{P_{ij}} \right) \cdot \frac{q^2}{R} \quad (1.4)$$

Бу ифодага ҳам бясгилаш киритамиз:

$$\alpha = \sum_j \left(\pm \frac{1}{P_j} \right) \quad (1.5)$$

Ушбу сон *Маделунг доимийси* деб аталади. Энди юқоридаги ифодамиз содда кўринишга келади:

$$U_F = Z \lambda \exp(-R/\rho) \text{ -- } \alpha \cdot \frac{q^2}{R} \quad (1.6)$$

Ифодадаги охирги ҳад энг яқин Z та атомлар ҳиссасини ҳам ўз ичига олади. Тўлиқ энергия учун эса:

$$U_T = N(Z \lambda \exp(-R/\rho) \text{ -- } \alpha \cdot \frac{q^2}{R}) \quad (1.7)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Мувозанат ҳолатда тўлиқ энергия R га боғлиқ эмас, яъни $\frac{dU_T}{dR} = 0$, шунинг учун

$$N \frac{\partial U_i}{\partial R} = - \frac{NZ\lambda}{\rho} \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) + \frac{N\alpha q^2}{R^2} = 0 \quad \text{ёки}$$

$$R^2 \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) = \frac{\rho \alpha q^2}{Z\lambda} \quad (1.8)$$

(1.7) ва (1.8) ифодалардан

$$U_T = - \frac{N\alpha q^2}{R} \left(1 - \frac{\rho}{R}\right) \quad (1.9)$$

келиб чиқади.

Бу ифодадаги ρ кичик сон бўлиб одатда $\rho = 0.1 R_0$ ни ташкил этади. Шунинг учун $U_T = - \frac{N\alpha q^2}{R}$ деб олишимиз мумкин. Демак,

ион боғланишли кристалларда боғланиш энергиясининг деярли ҳаммасини Қулон энергияси (ёки Маделунг энергияси) ташкил этар экан. Ҳарорат ёки босимнинг ўзгариши ион кристаллининг элементар катаги ўзгаришига олиб келиши мумкин. Ҳарорат ошиши билан мусбат ион (анион)нинг эффе́ктив радиуси манфий ион (катион)нинг эффе́ктив радиусига нисбатан тез катталашади. Натижада уларнинг радиуслари нисбати ўзгаради ва бу ўз навбатида тузилиш ўзгаришига олиб келади. Масалан, хлорли цезий (CsCl) ва хлорли рубидий (RbCl) кристаллари температура ошиши билан ҳажмий марказлашган кубдан содда кубга айланиб қолади. Хлорли калий, хлорли бром, хлорли йодларда эса босим

ошиши билан тескари ўтиш, яъни содда кубик панжарадан ҳажмий марказлашган панжарага айланиш кузатилади.

Ион кристалларини сувда эритилганда улар мусбат ва манфий ионларга парчаланадилар. Улар иссиқлик таъсирида эритилганда ҳам ионли суюқликка айланади. Буни уларнинг электрик токини яхши ўтказишидан билишимиз мумкин. Ионлар кристаллари паст температураларда электр токини яхши ўтказмайди. Ҳарорат ошиши билан ўтказувчанлик ҳам ортиб боради. Ионлар кристаллари инфрақизил нурларни яхши ютувчи моддалардир.

1.5.3. Молекуляр боғланишли кристаллар

Кристалл панжараси тугунларида молекулалар жойлашган кристалларни молекуляр боғланишли кристаллар деб аталади. Кристалдаги ҳар бир молекула ўзининг хоссаларини сақлайди. Ушбу кристалларга H_2 , N_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 , CH_4 , CO_2 , H_2O кристаллари мисол бўла олади. Молекулаларни кристалл панжарада тутиб турувчи кучлар бошқа турдаги кучларга нисбатан заиф бўлади. Уларни Ван-Дер-Ваалс кучлари деб аталади. Бу кучлар ўз навбатида молекулалар турига кўра уч хил бўлиши мумкин.

1. Агар кристалдаги молекулалар қутбли, яъни молекуланинг дипол ёки квадрупол моменти нолдан фарқли бўлса, кристалл молекулалари ўзаро *орейнтацион кучлар* билан таъсирлашадилар. Бундай молекулалар орасидаги тортишиш кучлари молекулаларни маълум бир йўналишга буришга ҳаракат қилади, шунинг учун *орейнтацион кучлар* деб аталади. Иссиқлик ҳаракати молекулаларнинг электрик моментлари йўналишларини доим ўзгартириб туришига қарамай, ҳамма йўналишлар бўйича ўртачалаштирилган таъсир кучи нолга тенг эмас. Орейнтацион таъсирнинг потенциал энергияси молекулалар орасидаги масофанинг олтинчи даражасига тескари пропорционал, яъни $U_{ii}(r) \sim P_1 P_2 r^{-6}$. Бу ерда P_1 ва P_2 лар таъсирлашувчи молекулаларнинг дипол моментлари. Молекулалар орасидаги таъсир кучи

$F = \frac{\partial U_{ii}(r)}{\partial r} \sim r^{-7}$, яъни молекулалар орасидаги масофанинг еттинчи даражасига тескари пропорционал. Бу кучлар масофа ортиши билан жуда тез камаяди. Ҳарорат ортиши билан молекула-

ларнинг йўналиши бузилади ва натижада ориентацион таъсир потенциал энергияси камаяди.

2. Кристалл қутбли ва қутбсиз молекулалардан ташкил топган бўлса, уларнинг молекулалари орасида *индукцион (поляризациян)* таъсир кучлари пайдо бўлади. Қутбли молекула ўз атрофида электр майдони ҳосил қилади. Бу майдон таъсирида қутбсиз молекула қутбланади ва унда индукцияланган дипол моменти ҳосил бўлади. Молекулалар орасидаги таъсир энергияси $U \sim p_1 \alpha_2 r^{-6}$ қутбли молекуланинг дипол моменти P_1 га, қутбсиз молекуланинг қутбланиш коэффициенти α_2 га тўғри пропорционал ва масофанинг олтинчи даражасига тескари пропорционал. Бу энергия температура ортиши билан ўзгармайди.

3. Учинчи турдаги Ван-дер-Ваалс кучларини *дисперсион кучлар* деб номланади. Бу кучлар қутбсиз молекулалар орасида пайдо бўлиб, уларнинг келиб чиқишини тушунтириш узоқ вақтлар қийинчилик туғдирган. Ушбу муаммо квант механикаси ёрдамида тушунтирилди. Қутбсиз молекулаларнинг дипол моментлари ўртача нолга тенг бўлса ҳам, вақтнинг жуда қисқа бўлакларида молекуладаги электронлар булути симметрияси бузилиб турарди. Натижада бу қисқа вақтда молекула маълум бир дипол моментга эга бўлади. Бу дипол майдони қўшни молекулада индукцион дипол моменти ҳосил қилади, натижада ўзаро таъсир кучлари пайдо бўлади. Молекулалар ўзаро таъсири потенциал энергияси ва кучи куйидагича ёзилади:

$$U_D(r) = \alpha_1 \alpha_2 r^{-6}, F_D(r) = r^{-7} \quad (1.10)$$

Бу кучларни дисперсион кучлар деб номланишининг сабаби моддадаги ёругликнинг дисперсияси ҳам молекулаларнинг юқорида келтирилган хоссаларига боғлиқлигидир.

Молекуляр боғланишли кристалларда, тортишиш кучларидан ташқари, молекулалар орасида итаришиш кучлари ҳам мавжуд. Бу кучлар молекулалар бир бирига жуда яқинлашганда пайдо бўлади. Квант механикасидаги Паули қонунидан электронлар қобиклари бир-бирига киришиб кетиши мумкин эмаслиги келиб чиқади. Демак, молекулаларнинг электронлар қобиклари бир-бирига яқинлашиши билан итаришиш кучлари пайдо бўлади. Тажрибалар кўрсатишича, бундай таъсир энергияси масофанинг ўн иккинчи даражасига, таъсир кучи эса ўн учинчи даражасига тескари пропорционалдир.

$$U_{\text{ат}}(r) = \frac{1}{r^{12}} \cdot A(r) - \frac{1}{r^{13}} \quad (1.11)$$

Молекулар орасидаги таъсир энергиясининг улар орасидаги масофага боғланиши ифодасини квант механикаси асосида келтириб чиқариш жуда мураккаб, шунинг учун одатда уни турли тақрибий кўринишда танлаб олинади. Кўп ҳолларда Леннард-Джонс ифодасидан фойдаланилади:

$$U(r) = -ar^6 + br^{12} \quad (1.12)$$

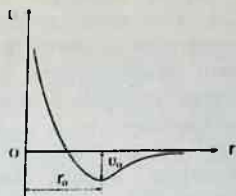
Энергиянинг минимум қийматига r_0 -масофа тўғри келади. Ушбу масофада молекулар орасидаги таъсир кучи нолга тенг бўлади. Бу масофа сон қийматини $U(r)$ ning r бўйича ҳосиласини нолга тенглаб топиш мумкин. r_0 -масофа кристалдаги молекулар орасидаги мувозанатий масофага тенгдир.

$$\left(\frac{\partial U(r)}{\partial r} \right)_{r=r_0} = 0$$

Ушбу ва шунга ўхшаш бошқа ифодаларнинг камчиликларидан бири — уларнинг молекулар орасидаги ориентацион ўзаро таъсирга қўллаб бўлмаслиғидир. Ориентацион ўзаро таъсирни ифодалаш учун кўп ҳолларда диполларнинг бурилиш бурчагини ҳисобга олувчи кўпайтувчи киритилади. Ҳозирги пайтда молекулар орасидаги ўзаро таъсирлар квант кимёси усуллари билан ҳисобланмоқда.

1.5.4. Металл боғланишли кристаллар

Суюқ ёки қаттиқ ҳолатларда металл атомлари бир-бирига жуда яқин келади ва электрон булутлари киришиб кетади. Натижада металл атомининг валент электронлари бир атомдан иккинчи атомга эркин ҳаракат қилиб ўта оладилар. Улар бутун металл бўйлаб ҳаракат қилиб юришлари мумкин. Бу электронлар ҳамма металл атомлари учун умумий бўлиб қоладилар. Улар эркин электронлар (ўтказувчанлик электронлари) ёки металлнинг электрон «гази» деб ҳам аталади. Металлнинг кристалл панжарасидаги атомлари ана шу умумлашган электронлар орқали ўзаро таъсирланидилар ва уларни панжара тугунларида тутиб туради.



1.11-чизма. Молекулараро таъсир энергияси $U(r)$

Металл атомлари жуда ҳам зич жойлашган бўлади ($K=12$, $K=8$). Кўп металллар ўзининг кристалл панжараси тузилишини температура ўзгариши билан ўзгартириб туради. Кристаллларнинг турли температурада турли турғун кристалл тузилишига эга бўлиши кристалл полиморфизми деб аталади. Металллар кристалл панжарасининг α , β , γ , σ деб номланган турғун турлари мавжуд бўлиб, улар турли температура оралиқларида турғун ҳолатда бўладилар. Металл боғланишли моддалар ковалент ёки ион боғланишли моддаларга нисбатан қаттиқлиги, эгилувчанлиги ва пластиклик хоссаларга эгаллиги билан ажралиб туради. Металларда эркин электронлар кўп бўлишлиги эса уларнинг яхши электр ва иссиқлик ўтказувчанлигини таъминлайди.

1.5.5. Водород боғланишли кристаллар

Водород боғланишли кристалларда водород атоми бир молекула билан кимёвий боғ ҳосил қилган ҳолда иккинчи молекула билан ҳам таъсирлашади, кутбланган водород атоми иккинчи молекулада ҳам дипол моменти индукциялайди ва натижада етарли даражада кучли боғланиш ҳосил бўлади. Водород боғланишни модданинг учала агрегат ҳолатларида ҳам кузатиш мумкин. Водород боғлар электроманфийлиги юқори бўлган атомлар, масалан, F , O ва N орасида яққол намоён бўлади. Водород атоми ўзининг ягона электронини қўшни атомга бериб мусбат ионга айланади ва иккинчи қўшни атом билан ион боғланиш ҳосил қилади. Водород боғланиш органик моддалар молекулалари орасида ҳам кўп учрайди. Сув молекуласининг кўп ажойиб хоссалари водород боғланиш хоссасидан келиб чиқади. Юқорида келтирилган кристаллардаги боғланиш турлари яқка ҳолда кузатилмайди. Кристалдаги атом ёки молекула орасида бир пайтда бир неча боғланиш турлари кузатилиши мумкин. Лекин, маълум бир шароитда кристалларда бирор боғланиш тури устивор бўлиши мумкин. Ана шу нуқтаи назардан кристал боғланишлари турларга ажратилади.

1.6. Кристалларни ўстириш

Модданинг кристалл бўлмаган ҳолатидан (суyoқлик, газ, аморф) кристал ҳолатига (фазасига) ўтиши жараёни *кристалланиш* деб аталади. Кристалланиш бошланиши учун ўтиш ҳолатида турган моддада (тўйинган эритма, совутилган

қотишма ва ҳ.к.) термодинамик мувозанат бузилиши зарур. Кристалланиш жараёнида ажраб чиққан иссиқлик миқдори кристалланишнинг яширин иссиқлиги деб номланади. Модда кристалланиши учун суюлиш температурасидан паст температурагача совутилиши керак. Ҳарорат маълум бир критик қийматиغا етганда моддада кристал бўлақчалар пайдо бўла бошлайди. Бу критик температура модданинг таркибига, ундаги бегона зарраларнинг зичлигига, модда солинган идишнинг девори ҳолатига ва бошқа бир қатор омилларга боғлиқ. Айрим тоза металлларни суюлиш температурасидан икки марта паст температурагача совутилса ҳам кристалланмай қолаверади.

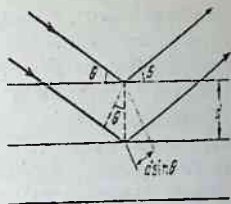
Катта монокристалларни тўйинган эритмалардан ўстирилади. Уларга одатда кичкина «қармоқ» кристалчаси туширилади ва аста секинлик билан юқорига кўтарилади. Бу усул кристални тагликка қўйиб ўстиришдан кўра яхши натижалар беради. Ҳозирги пайтда кристалларни ўстиришнинг тигелсиз, Чохралский, эпитаксиал усуллари қўлланилади.

1.7. Полиморфизм

Қаттиқ jismlar турли температура ва босимларда турлича кристалл тузилишга эга бўлиши мумкин. Бу ҳодисани полиморфизм деб аталади. Масалан, углерод (карбон) атомлари олмос кўринишида ҳам, графит кўринишида ҳам бўлиши мумкин. Бу икки кристал тузилиши бир — биридан физик хоссалари жиҳатидан кескин фарқ қилади. Кубик тузилишга эга бўлган олмос жуда қаттиқ, шаффоф кристал, гексагонал тузилишли, графит эса мўрт ва ёруғлик ўтказмайди. Ушбу моддалар бир кристалл тузилишдан иккинчисига ўтиши учун маълум бир шароит (температура ва босим) бўлиши зарур. Ундан ташқари, ўтиш жараёнида атомлар энергетик тўсиқни енгиб ўтишлари зарур. Агар энергетик тўсиқ етарлича катта бўлса, бундай ўтиш ташқи таъсирсиз содир бўлмаслиги ҳам мумкин. Масалан, олмос $T > 1500^0 K$ ва $p = 10^8 Pa$ бўлган шароитда барқарор фазада бўлади, лекин, агар биз олмосни атмосфера босими ва хона температурасига ўтказиб қўйсақ ҳам, у графитга айланиб қолмайди. Олмос нормал шароитда ҳам узоқ вақт сақланиши мумкин. Полиморф ўзгаришлар натижасида кристалда кимёвий боғланиш тури ўзгариши мумкин. Оддий шароитда ковалент боғланган Si ва Ge ярим ўтказгичлари юқори босимларда металл боғланишли кристал тузилишга ўтиши мумкин.

1.8. Кристалларда рентген нурлари дифракцияси

Кристалл панжараси тузилишини бевосита катталаштириб тасвирга тушириш кам ҳолатлардагина мумкин. Шунинг учун кристалл панжараси тузилишини ўрганишда рентген нурларининг кристал панжарадаги дифракциясидан фойдаланилади. Тўлқин узунлиги катта бўлган нурлардан ҳам фойдаланиб бўлмайди, чунки дифракцияни кузатиш учун тўлқин узунлиги дифракцион панжара даври чамасида бўлиши лозим. Кристалл панжарасидаги рентген нурлари дифракциясини энг содда қилиб биринчи марта У. Брегг ва Г. А. Вулфлар тушунтириб беришди. Рентген нурлари кристалга тушгач, улар турли атом текисликларидан қайтадилар ва рентген нурларининг йўл фарқи тўлқин узунлигига каррали бўлганида дифракцион максимумлар, яъни ёруғ нуқталар пайдо бўлади. Агар кристалдаги икки текислик орасидаги масофа d га тенг бўлса, ва рентген нурлари θ бурчак остида тушса, у ҳолда 1.12-чизмада кўрсатилганидек икки нурнинг йўл фарқи $2d\sin\theta$ га тенг бўлади. Дифракцион максимум шарти эса,



1.12-чизма. Кристалдан рентген нурлар дифракцияси.

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad (1.13)$$

бу ерда n - бутун сон λ - рентген нурининг тўлқин узунлиги.

Ушбу ифода Брегг-Вулф қонуни деб ҳам юритилади. Кристалл панжарасидан жуда кўп атом текисликларини ўтказиш мумкин (1.4- чизма). Дифракция максимумлари улар учун ҳам бажарилиши мумкин. Шунинг учун дифракцияни қайд қилувчи фотоплёнкада бир қанча ёруғ нуқталарни кўрамыз.

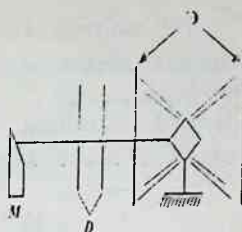
Брегг-Вулф қонунига асосан рентген нурлари кристалдан қайтиши учун λ ва θ ўртасида маълум бир шарт бажарилиши керак. Агар биз монохроматик нурни ихтиёрий бурчак остида уч ўлчовли кристал панжарасига туширсак, ҳеч қандай дифракция кузатилмаслиги мумкин. Дифракцион тасвир ҳосил қилиш учун биз λ -ни ёки θ - ни секин аста ўзгартириш, яъни сканерлаш имкониятига эга бўлишимиз керак. Ҳозирги пайтда кристаллар тузилишини ўрганишнинг асосан уч хил усули қўлланилади.

1.8.1. Лауэ усули

Бу усулда рентген нури M манбадан (1.13- чизма) чиқиб, D - диафрагмадан ўтади ва маҳкамланган K - монокристалга тушади.

Рентген нурларининг монохроматик бўлмайди, унинг таркибида иложи борича катта диапазондаги тўлқин узунлиги нурлар ҳосил қилинади.

Ингичка рентген нури кристалга тушган. Брэгг-Вулф қонунига биноан мос йўналишларда дифракцион максимумлар ҳосил бўлади. Бу ёруғ нуқталар кристални олди ва орқасига ўрнатилган Σ — экрандаги фотоплёнкаларда тасвир ҳосил қиладилар. Ушбу усул кристалл панжара тuzилишини, симметриясини аниқлашда яхши самара беради. Кристалга тўлқин узунликлари турлича бўлган рентген нурлари тушганлиги учун бу усулда тўлқин узунлиги бўйича сканерланмоқда дейиш мумкин.



1.13-чизма. Рентген нурлари дифракцияси Лауэ усули.

1.8.2. Кристални айлантириш усули

Бунда ўққа маҳкамланган монокристалл шу ўқ atroфида айланиб туради (бурчак бўйича сканерлаш). Монокристалга монохроматик рентген нури туширилади. Кристал Брэгг-Вулф шартини қаноатлантирувчи бурчакка бурилганда фотоплёнкада дифракцион максимум ҳосил бўлади. Бу усул мураккаб молекулалар тuzилишини аниқлашда кенг қўлланилади.

1.8.3. Кукун (порошок) усули

Бу усулда монокристалл намуна майдаланиб кукун ҳолига келтирилади ва юпқа шиша идишли капилляр найга солинади. Камерага маҳкамланган идишга монохроматик рентген нурлари туширилади. Тушаётган нурлар Брэгг-Вулф шартини бажарувчи вазиятда ётган кристал бўлакчаларидан қайтадилар. Ушбу усулнинг қулайлик томони шундаки, йирик монокристалларни ишлатишнинг ҳожати йўқ.

Агар кристалл панжарасининг трансляцион векторлари $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ маълум бўлса, у ҳолда \bar{k} тўлқин векторли рентген нури тушганда дифракция ҳосил бўлиш шартларини кўриб чиқамиз. Фараз қилайлик, \bar{k}' йўналишда қайтган рентген нурларида дифракция кузатилди, у ҳолда Брэгг-Вулф шартига асосан $\Delta\bar{k} = \bar{k}' - \bar{k}$ вектор қуйидаги шартларни қаноатлантириши зарур.

$$\bar{a}_1\Delta\bar{k} = 2\pi n_1, \quad \bar{a}_2\Delta\bar{k} = 2\pi n_2, \quad \bar{a}_3\Delta\bar{k} = 2\pi n_3 \quad (1.14)$$

Бу ифодада n_1, n_2, n_3 лар бугун сонлар. Ушбу ифода Лауэнинг дифракция тенгламалари деб аталади.

1.9 Тескари панжара

Юқориди келтирилган $\Delta\bar{k}$ векторини яъни тушаётган ва дифракция шarti бажарилган йўналишда қайтаётган рентген нурларининг тўлқин векторлари фарқини биз векторлар йигиндиси кўринишида тасвирлаб олишимиз мумкин:

$$\Delta\bar{k} = n_1\bar{b}_1 + n_2\bar{b}_2 + n_3\bar{b}_3 \quad (1.15)$$

(1.14) ифодадан: $\bar{a}_1\Delta\bar{k} = \bar{a}_1n_1\bar{b}_1 + \bar{a}_1n_2\bar{b}_2 + \bar{a}_1n_3\bar{b}_3 = n_1\bar{a}_1\bar{b}_1 = 2\pi n_1$, яъни $\bar{a}_1\bar{b}_1 = 2\pi$ эканлиги келиб чиқади. Худди шунингдек $\bar{a}_2\bar{b}_2 = 2\pi$, $\bar{a}_3\bar{b}_3 = 2\pi$ Демак \bar{b}_1 вектор \bar{a}_2 ва \bar{a}_3 га тик, \bar{b}_2 эса \bar{a}_1 ва \bar{a}_3 га, \bar{b}_3 вектор \bar{a}_1 ва \bar{a}_2 га тик (чунки скаляр қўлайтмалари нолга тенг). Шунинг учун $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3$ векторларни қуйидагича танлаб оламиз:

$$\bar{b}_1 = 2\pi[\bar{a}_2\bar{a}_3] / V_0, \quad \bar{b}_2 = 2\pi[\bar{a}_3\bar{a}_1] / V_0, \quad \bar{b}_3 = 2\pi[\bar{a}_1\bar{a}_2] / V_0 \quad (1.16)$$

Ушбу $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3$ векторлари кристаллнинг *тескари панжараси* векторлари деб аталади. (1.16) ифодалар маҳражидаги $V_0 = \bar{a}_1[\bar{a}_2\bar{a}_3]$ - тўғри панжара элементар катагининг ҳажмини билдиради. Тескари панжара абстракт тушунча бўлиб, кристалдаги айрим ҳодисаларни ифодалашни осонлаштиради. Масалан, кристалда дифракция,

тулқинларнинг тарқалиши, квази зарраларнинг (фонон, солитон, плазмон ва ҳ.к.) энергетик спектрларини таҳлил қилишда фойдаланилади. Тескари панжарадан фойдаланиб, Лауэнинг дифракция тенгламасини бошқа кўринишда ёзишимиз мумкин:

$$\bar{b}_n = n_1 \bar{b}_1 + n_2 \bar{b}_2 + n_3 \bar{b}_3 \text{ деб оламиз, у ҳолда (1.15) га асосан,}$$

$$\Delta \bar{k} = \bar{k}' - \bar{k} = \bar{b}_n, \quad (1.17)$$

$|\bar{k}'| = |\bar{k}|$ эканлигидан ва (1.17) дан $k_2 = k_2' = (b_n + k)^2$ келиб чиқади

$$k'^2 = b_n^2 + k^2 + 2(\bar{b}_n \bar{k}), \quad k^2 = k'^2, \text{ бўлгани учун}$$

$$\bar{b}_n^2 + 2(\bar{b}_n \bar{k}) = 0 \quad (1.18)$$

ҳосил қиламиз.

Ушбу ифода кристаллдаги рентген нурлари дифракциясини тескари панжара вектори орқали тавсифидир. Тескари панжара векторларининг куйидаги хоссалари мавжуд.

а) Тескари ва тўғри панжара векторларининг скаляр кўпайтмаси бутун сонга тенг.

$\bar{b}_m = m_1 \bar{b}_1 + m_2 \bar{b}_2 + m_3 \bar{b}_3$ бўлсин. $\bar{a}_n = n_1 \bar{a}_1 + n_2 \bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3$. Бу ҳолда $(\bar{b}_m \bar{a}_n) = m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3$, яъни бутун сон бўлади.

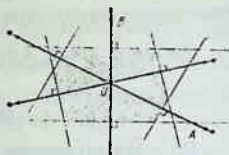
б) \bar{b}_m вектор узунлиги текисликлар орасидаги масофанинг тескарисига каррали $|\bar{b}_m| = m/d$, m - бутун сон, d - текисликлар орасидаги масофа.

в) \bar{b}_m вектори ўзининг ташкил этувчилари индекслари билан бир хил Миллер индексли текисликларга тик йўналган.

1.10. Бриллюэн зонаси

Бриллюэн зоналарини тушунтириш учун икки ўлчовли кристал панжарасини кўриб чиқамиз (1.14-чизма). Кристалл панжара тугунидаги А атомнинг атрофидаги атомлар билан бирлаштириб чиқамиз. Ҳар бир қўшни атом билан бирлаштирувчи чизиқнинг ўртасидан шу чизиққа тик кесма билан тенг иккига бўламиз. Ҳосил бўлган штрихланган шакл Вигнер-Зейц элементар катаги деб аталади. Ушбу катакни текисликда трансляция векторлари бўйича кўчирсак, кристалл панжара тузилишини тиклаш мумкин,

яъни *Вигнер-Зейц* элементар катаги ҳам элементар катак танлашнинг бир усулидир. Энди ушбу кристал панжарага тескари панжарани туяимиз ва бу панжарада ҳам юқоридаги тартибда элементар катак ажратиб оламиз. Тескари панжарадаги ушбу катак биринчи *Бриллюэн зонаси* деб аталади. Бриллюэн зонасининг физик моҳияти шундан иборатки, Бриллюэн зонаси ичида ётувчи k тўлқин векторига эга бўлган барча рентген нурлари Брэгг - Вульф шартига асосан кристалдан қайгиши мумкин. Ҳозирги қунда Бриллюэн зоналари кристаллографияда ишлатилма-сада, кристалларнинг зоналар назария-сида жуда муҳим аҳамиятга эга.



1.14- чизма Бриллюэн зонасини доир.

Бриллюэн зонасидаги электронлар ўзининг энергиясини ва им-пулсини узлуксиз ўзгартира оладилар. Бриллюэн зонасини тарк этиш учун электронларнинг энергияси сакраб ўзгариши керак.

Саволлар ва масалалар

1. Қаттиқ жисмлар улардаги молекула ва атомларнинг боғланишига қараб қандай турларга бўлинади?
2. Кристалл панжарасининг нуқтавий ва трансляцион сим-метрийси деганда нимани тушунаси?
3. Миллер индекслари нима?
4. Браве панжаралари ва кристалл сингониялари фарқини ту-шунтириб беринг?
5. Ёқий ва ҳажмий марказлашган ҳамда содда кубик кристалл панжарасининг элементар катагида нечта атом жойлашган бўлади?
6. Идеал зич гексагонал панжара учун $|a_3/a_1|=1,633$ эканлигини кўрсатинг.
7. Содда кубик панжарали калий бром кристаллининг зичли-гини топинг? ($a=6,59 \text{ \AA}$)
8. Гексагонал панжарали кристаллнинг элементар катагининг ҳажмини топинг? a_1 ва a_3 лар берилган деб ҳисобланг.
9. Қадмий кристалли зич гексагонал кристалл панжарасига эга. Агар $a_1=2,97 \text{ \AA}$, $a_3=5,61 \text{ \AA}$, бўлса, кадмий кристаллининг зич-лигини аниқланг?
10. Полиморфизм ҳодисасини тушунтиринг?

II БОБ

КРИСТАЛЛ ПАНЖАРАСИ ТЕБРАНИШЛАРИ

Кристалл панжараси динамикасини таҳлил қилишнинг икки услуби маълум. Улардан бири микроскопик (атомистик) услуб дейилиб, унинг асосини кристалл панжарасида атомлар (ионлар, молекулалар)нинг даврий дискрет жойлашиши ва уларни бирга тутиб турувчи кучлар ҳақидаги тасаввурлар ташкил қилади. Бу услуб кристалл бўйлаб тарқалаётган тўлқинлар λ узунлиги панжара a доимийси (икки қўшни атом марказлари орасидаги ўртача ёки мувазанатий масофа)дан бирмунча катта бўлган ҳолда, яъни

$$\lambda > a \quad (2.1)$$

муносабат бажарилган ҳолда маъқул бўлади. Иккинчи услубни макроскопик ёки континуал услуб дейилади. Бу услубнинг қўлланиши учун

$$\lambda \gg a \quad (2.2)$$

шарт бажарилиши зарур. Тажрибадан маълум бўлишича, металл, ионли ва ковалент кристалларда тарқаладиган ўз товуш тебранишлари тезлиги 5000м/с, 1 Гц тақрорийликка $\lambda = 5\text{мкм}$ тўлқин узунлиги тўғри келади. Бу эса одатдаги панжара доимийси $a = 2,5 \cdot 10^{-10}\text{м}$ дан 2000 марта катта. Бу услубда қаттиқ жисмни туташ муҳит деб қаралади. Ҳар икки услубнинг фазилатлари ва камчиликлари бор. Улар қаттиқ жисм динамикасини ўрганишда бир бирини тўлдиради.

Энди биз бу услубларни баён қилишга киришамиз.

2.1. Чизигий содда панжара атомларининг тебранишлари

Кристаллнинг таркибидаги зарралар (атомлар, ионлар, молекулалар) фақат мутлоқ нол температурада панжара тугунларида тинч туради. Температура ошган сайин атомлар (бундан кейин таркибий зарраларни атомлар деб атаймиз, таҳлилдан келиб чиқадиган хулосаларни, масалан, ионлардан таркибланган кри-

сталларга талбиқлаш мумкин) тебранма ҳаракати амплитудаси ор-
тиб боради.

Атомлар чексиз бир чизиқ устида даврий равишда (ҳар икки
қўшни бир-биридан a масофада) жойлашган. Ҳар бир атом энг
яқин икки ён қўшниси билан квази эластик ўзаро таъсирлашади.
Бу фараз атомларнинг мувозанат вазиятидан четланиши кичик,
яъни $|u_n| \ll a$ бўлганида адолатли бўлади. Квази эластик кучлар
таъсирида атомлар гармоник тебранишлар бажарадилар.
 u_n, u_{n-1}, u_{n+1} — тегишли атомлар силжишлари.

Квази эластик куч таърифи бўйича, силжишнинг биринчи дара-
жасига пропорционал, унинг
йўналишига қарши йўналган бўлади.
Демак, n - атомга $n-1$ атомнинг таъсир
кучи

$$f_{n,n-1} = -\beta(u_n - u_{n-1}), \quad (2.3)$$

$n+1$ атомнинг таъсир кучи:

$$f_{n,n+1} = -\beta(u_n - u_{n+1}) \quad (2.4)$$

бўлиб, n - атомга таъсир қилаётган
натижавий куч:

$$f_n = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}), \quad (2.5)$$

бу ерда β — квази эластик куч коэффициенти.

Ньютоннинг иккинчи қонунига асосан n - атомнинг ҳаракат
тенгламаси:

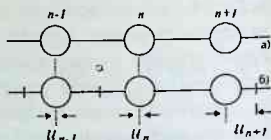
$$\frac{md^2 u_n}{dt^2} = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}). \quad (2.6)$$

Унинг ечими чопувчи тўлқин кўринишида бўлади;

$$u_n = A e^{-i(qan - \omega t)}. \quad (2.7)$$

Бу ифодада A — амплитуда, $(qan - \omega t)$ — фаза дейилади, a —
координата бошидан n — атомгача дискрет масофа, $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ —

тўлқин сон, ω — такрорийлик, t — вақт, λ — тўлқин узунлиги.
(2.6) тенгламага (2.7) ечимни қўйсақ,



2.1- чизма. а) чизигий содда
панжарада атомларнинг мувозан-
атли вазияти;

б) вертикал чизиклар силжиган
атомлар вазияти.

$$-m\omega^2 = -\beta(2 - e^{-iqa} - e^{iqa}) \quad (2.8)$$

$e^{-iqa} + e^{iqa} = 2 \cos aq$ бўлганидан

$$\omega^2 = 2 \frac{\beta}{m} (1 - \cos aq) = 4 \frac{\beta}{m} \sin^2 \frac{aq}{2}$$

ёки

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{aq}{2} \right| = \omega_m \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (2.9)$$

ифодани ҳосил қиламиз, бунда ω_m — максимал такрорийлик.

Агар ω такрорийлик q тўлқин сон билан (2.9) дисперсион муносабат орқали боғланган бўлса, у ҳолда (2.7) орқали ифодаланган чопувчи тўлқин (2.6) тенгламанинг ечими бўлади. Баъзи хулосалар ҳақида тўхталамиз. $\omega = \omega(q)$ функция даврий ўзгаради [(2.9)га қаранг].

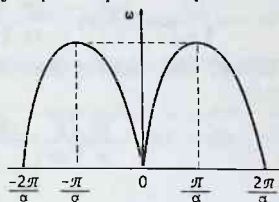
q ни (2.7) ифодада $q' = q + \frac{2\pi n}{a}$ га алмаштирсак, $u'_n = u_n$ бўлиб чиқади, яъни q ва q' физик жиҳатдан фарқсиз. Бошқача айтганда, q ўзгаришларининг ҳар қандай $\frac{2\pi}{a}$ кенгликдаги оралигини қараш етарлидир. q нинг асосий ўзгариш оралиги қилиб

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a} \quad (2.10)$$

соҳани танлаб олиш мумкин.

$\omega = \omega(q)$ боғланиш $\frac{2\pi}{a}$ давр билан ўзгариши 2.2-расмдан кўриниб турибди, бунда

$$q=0 \text{ да } \omega=0,$$



2.2- чизма. $\omega(q)$ боғланиш

$$q = \pm \frac{\pi}{a} \text{ да } \omega = \omega_m.$$

$q = \frac{2\pi}{\lambda}$ муносабатга кўра $q=0$ да $\lambda_{\max} = \infty$, $q = \pm \frac{\pi}{a}$ да $\lambda_{\min} = 2a$.

Демак, энг кичик тўлқин узунлиги $2a$ бўлиб, энг каттаси чексиздир.

Максимал такрорийлик ва минимал тўлқин узунлиги мавжудлиги дискрет атомлар тузими тебранишларига хос хусусиятдир. Биз кўрган ҳол атомлар чексиз занжирига тегишли эди. Кристалларнинг макроскопик намуналари кўп, аммо чекли сондаги атомлардан таркибланган. Атомлар занжирчаси чегаралари таъсирини назарий бартараф қилиш учун G та атомларни катта радиусли айлана бўйлаб жойлаштирилади деб фараз қилиб,

$$u_{n \pm G} = u_n \quad (2.11)$$

кўринишдаги Борн-Карман айланавий шартини киритиш мумкин, бунда $n \pm G$ атом n - атом билан битта. Бу шартдан (2.10) ўрнига

$$-\frac{G}{2} \leq g \leq \frac{G}{2} \quad (2.12)$$

шарт (g -бутун сон) келиб чиқади. Демак, G атомдан ташкил топган чизигий занжирчанинг эркинлик даражалари G та, бинобарин, q нинг қийматлари шу сонга тенг бўлади. (2.11) шартдан:

$$q = \frac{2\pi}{a} \frac{g}{G}. \quad (2.13)$$

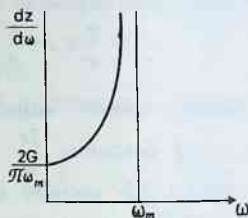
ω дан $\omega+d\omega$ бўлган оралиқда қанча сонда тебранишлар бор деган саволга жавоб топайлик. (2.9) ифодадан

$$d\omega = a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \cos \frac{aq}{2} \right| dq = \frac{2\pi}{G} \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| dg.$$

Демак, $d\omega$ оралиқдаги тебранишлар сони

$$dz = 2dg = \frac{G}{\pi} \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \frac{d\omega}{\cos \frac{aq}{2}} \right|. \quad (2.14)$$

бўлади. Бундан тебранишлар сони зичлиги:



2.3-чизма. $dz/d\omega$ боғланиш.

$$\frac{dz}{d\omega} = \frac{2G}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}. \quad (2.15)$$

Эластиклик назариясидан маълумки, товуш тезлиги v_0 эластиклик модули ва зичлик орқали ифодаланади.

$$v_0 = \sqrt{\frac{E}{\rho}} = a\sqrt{\beta} \quad (2.16)$$

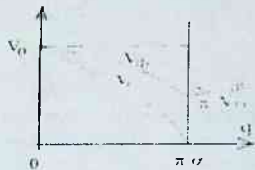
Узун тўлқинлар учун $\left(\frac{aq}{2} = \frac{a\pi}{\lambda} \leq 1\right)$ юқоридаги (2.9) ифодадан ω билан q орасида пропорционал боғланиш бўлишиги келиб чиқади:

$$\omega = v_0 q \quad (2.17)$$

Аммо умумий ҳолда тўлқинлар дисперсияси мавжуд. Бунда фаза тарқалиши тезлиги v_f ни ва тўлқинларнинг гуруҳий тезлиги v_g ни бир-биридан фарқи бор. Ҳақиқатан ҳам (2.9) асосида олинган

$$v_f = \frac{\omega}{|q|} = v_0 \frac{\left|\sin \frac{aq}{2}\right|}{\frac{aq}{2}} \quad (2.18)$$

$$v_g = \left|\frac{d\omega}{dq}\right| = v_0 \left|\cos \frac{aq}{2}\right| \quad (2.19)$$



ифодалар графиклари (2.4-чизма) бу фарқни кўрсатиб турибди. Бунда биз чизигий содда панжарада тебранишлари ва тўлқинларнинг гармоник тақрибда таҳлил қилганимизни таъкидлаймиз.

2.4-чизма. Фазавий ва гуруҳий тезлик тарвиҳи q га боғланиши.

2.2. Чизигий мураккаб панжарада тебранишлар ва тўлқинлар

Энди биз элементар катагида икки атом бўлган мураккаб бир ўлчамли (чизигий) чексиз панжарада тебранишлар ва тўлқинларни қараб чиқайлик. NaCl , CsCl каби ионлардан таркибланган, Si ва Ge каби атомлардан таркибланган кристаллар элементар ячеёкасида 2 та атом бўлади.



2.5-чизма. Чизигий мураккаб панжарада атомлар жойлашиши.

Қаралаётган чизигий панжарада атомлар диврий жойлашиши 2.5-чизмада тасвирланган. Биринчи хил атомлар $n'-1$, n' , $n'+1$ равишда, иккинчи хил атомлар $n''-1$, n'' , $n''+1$ равишда белгиланган.

Бу ҳолда ҳам гармоник тақрибда иш кўрамыз. Ҳар бир атом энг яқин икки қўшниси билан ўзаро таъсирлашади деб ҳисоблаймиз. Бунда n' ва n'' атомлар орасидаги квази эластик таъсир кучи коэффициентини β_1 , аммо n' ва $n''-1$ атомлар орасидаги таъсир кучи коэффициентини β_2 деб фараз қиламиз. Биринчи ва иккинчи хил атомлар массалари мос равишда m' ва m'' бўлсин.

n ва n' атомларнинг силжишларини u'_n ва u''_n деб, бошқалариникини $u'_n - 1, u'_n + 1, u''_n - 1, u''_n + 1$ деб белгилаб қуйидаги ҳаракат тенгламаларини ёза оламиз:

$$m' \frac{d^2 u'_n}{dt^2} = -\beta_1 (u'_n - u''_n) - \beta_2 (u'_n - u''_n), \quad (2.20)$$

$$m'' \frac{d^2 u''_n}{dt^2} = -\beta_1 (u''_n - u'_n) - \beta_2 (u''_n - u''_{n+1}). \quad (2.21)$$

Квази эластик куч таъсирида ҳамма вақт гармоник ҳаракат юзага келишини эътиборга олсак, (2.20) ва (2.21) тенгламаларининг ечимлари

$$u'_n = A' e^{-i(\varphi n - \omega t)}, \quad u''_n = A'' e^{-i(\varphi n - \omega t)}. \quad (2.22)$$

Бунда a панжара доимийси-иккита бир хил қўшни атом орасидаги масофа, (2.22) ечимларини (2.20) ва (2.21) га олиб бориб қуйида, баъзи амаллардан сўнг A' ва A'' амплитудалар учун иккита тенглама ҳосил бўлади:

$$\left[\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'} \right] A' + \left[\frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-i\varphi a}}{m'} \right] A'' = 0, \quad (2.23)$$

$$\left[\frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-i\varphi a}}{m''} \right] A' + \left[\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m''} \right] A'' = 0. \quad (2.24)$$

Бу икки чизилгй бир жисди тенгламалар системаси бўлиб, A' ва A'' номуълумлар оддидати қулайлувчилардан тузилган аниқловчи (детерминант)

$$\Delta = \begin{vmatrix} \omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'} & \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iq}}{m'} \\ \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iq}}{m'} & \omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.25)$$

булгандагина юқоридаги система маъноли ечимларга эга бўлади. (2.25) аниқловчи очиб чиқилса, ω^2 га нисбатан квадрат тенглама ҳосил бўлиб, унинг ечимлари иккита бўлади:

$$\omega_1^2 = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left\{ 1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right\}, \quad (2.26)$$

$$\omega_2^2 = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left\{ 1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right\}. \quad (2.27)$$

Бунда,

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)(m' + m'')}{m'm''}, \quad \gamma^2 = 16 \left[\frac{\beta_1 \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} \right] \cdot \left[\frac{m'm''}{(m' + m'')^2} \right]$$

Агар ω ва q орасидаги боғланиш (2.26) ва (2.27) кўринишда бўлса, (2.22) ечимлар (2.20) ва (2.21) ҳаракат тенгламаларини қаноатлантиради.

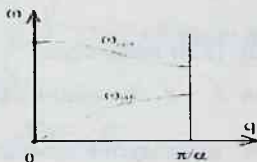
(2.26) ва (2.27) ечимлар асосида қуйидаги муҳим хулосалар келиб чиқади.

1. (2.26) ва (2.27) ифодалар тебранишларнинг икки тармоғини аниқлайди. (2.26) ифода тавсифлайдиган тармоқни акустик тармоқ, (2.27) тармоқни оптик тармоқ дейилади. Мазкур ифодалардан

$$\omega_{ин}(0) = \omega_0, \quad \omega_{ин}\left(\frac{\pi}{a}\right) = \omega_{опт}\left(\frac{\pi}{a}\right) = \omega_{опт}(0) = 0 \quad (2.28)$$

муносабатлар акустик тармоқ оптик тармоқдан пастда жойлашган, у нол такрорийликдан бошлангани ҳолда оптик тармоқ анча юқори такрорийликли тебранишларни ўз ичига олади (2.6-чизма).

2. Акустик ва оптик тармоқларда тебранишлар феълени қарайлик. (2.22) — (2.24) ифодалардан



2.6-чизма $\omega(q)$ боғланиш тармоқлари.

Бу ҳолда ҳам гармоник тақрибда иш кўрамыз. Ҳар бир атом энг яқин икки қўшниси билан ўзаро таъсирлашади деб ҳисоблаймиз. Бунда n' ва n'' атомлар орасидаги квази эластик таъсир кучи коэффициентини β_1 , аммо n' ва $n''-1$ атомлар орасидаги таъсир кучи коэффициентини β_2 деб фараз қиламиз. Биринчи ва иккинчи хил атомлар массаларни мос равишда m' ва m'' бўлсин.

n ва n' атомларнинг силжишларини u'_n ва u''_n деб, бошқалариникини $u'_n - 1, u'_n + 1, u''_n - 1, u''_n + 1$ деб белгилаб кўйидаги ҳаракат тенглаларини ёза оламиз:

$$m' \frac{d^2 u'_n}{dt^2} = -\beta_1(u'_n - u''_n) - \beta_2(u'_n - u''_n), \quad (2.20)$$

$$m'' \frac{d^2 u''_n}{dt^2} = -\beta_1(u''_n - u'_n) - \beta_2(u''_n - u''_{n+1}). \quad (2.21)$$

Квази эластик куч таъсирида ҳамма вақт гармоник ҳаракат юзага келишини эътиборга олсак, (2.20) ва (2.21) тенглаларнинг ечимлари

$$u'_n = A' e^{i(qn - \omega t)}, u''_n = A'' e^{-i(qn - \omega t)}. \quad (2.22)$$

Бунда a панжара доимийси-иккита бир хил қўшни атом орасидаги масофа, (2.22) ечимларини (2.20) ва (2.21) га олиб бориб кўйилса, баъзи амаллардан сўнг A' ва A'' амплитудалар учун иккита тенглама ҳосил бўлади:

$$\left[\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'} \right] A' + \left[\frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iq}}{m'} \right] A'' = 0. \quad (2.23)$$

$$\left[\frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iq}}{m''} \right] A' + \left[\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m''} \right] A'' = 0. \quad (2.24)$$

Бу икки чизигий бир жишли тенглалар системаси бўлиб, A' ва A'' номуқадумлар олдидан қунайтувчилардан тузилган аниқловчи (детерминант)

$$\Delta = \begin{vmatrix} \omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'} & \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iq}}{m'} \\ \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iq}}{m''} & \omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m''} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.25)$$

бўлгандагина юқоридаги система маъноли ечимларга эга бўлади. (2.25) аниқловчи очиб чиқилса, ω^2 га нисбатан квадрат тенглама ҳосил бўлиб, унинг ечимлари иккита бўлади:

$$\omega_1^2 = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left[1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right] \quad (2.26)$$

$$\omega_2^2 = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left[1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right] \quad (2.27)$$

Бунда,

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)(m' + m'')}{m'm''} \cdot \gamma^2 = 16 \left[\frac{\beta_1 \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} \right] \cdot \left[\frac{m'm''}{(m' + m'')^2} \right]$$

Агар ω ва q орасидаги боғланиш (2.26) ва (2.27) кўринишда бўлса, (2.22) ечимлар (2.20) ва (2.21) ҳаракат тенгламаларини қаноатлантиради.

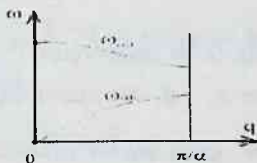
(2.26) ва (2.27) ечимлар асосида қуйидаги муҳим хулосалар келиб чиқади.

1. (2.26) ва (2.27) ифодалар тебранишларнинг икки тармогини аниқлайди. (2.26) ифода тавсифлайдиган тармоқни акустик тармоқ, (2.27) тармоқни оптик тармоқ дейилади. Мазкур ифодалардан

$$\omega_{m'}(0) = \omega_0, \omega_{m''}\left(\frac{\pi}{a}\right) = \omega_{m''}\left(\frac{\pi}{a}\right), \omega_{m''}(0) = 0 \quad (2.28)$$

муносабатлар акустик тармоқ оптик тармоқдан пастда жойлашган, у нол такрорийликдан бошлангани ҳолда оптик тармоқ анча юқори такрорийликли тебранишларни ўз ичига олади (2.6-чизма).

2. Акустик ва оптик тармоқларда тебранишлар феълени қарайлик. (2.22) — (2.24) ифодалардан



2.6-чизма. $\omega(q)$ боғланиш тармоқлари.

$$\frac{u'_n}{u''_n} = \frac{A'}{A''} = \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-i\omega t}}{(\beta_1 - \beta_2) - m' \omega} \quad (2.29)$$

муносабат олиш мумкин. Уни чегаравий ҳолатларда кўрайлик.

А) Чексиз узун тўлқинлар ҳолида

$$\lambda = \infty, q = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) = 0$$

Бу ҳолда

$$\left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{\lambda \rightarrow \infty} = 1 \cdot \left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{m=0} = -\frac{m'}{m''}. \quad (2.30)$$

Демак, акустик тармоққа тегишли тебранишлар тўлқинлари чексиз узун бўлганида атомлар бир фазада тебранади, яъни $u'_n = u''_n$ бўлади. Оптик тармоқда эса бу ҳолда атомлар бир бирига қарши фазада тебранади, ammo уларнинг огирлик маркази ҳаракатсиз қолади.

Биринчи тармоқ эластик акустик тўлқинларга мос келади, шундан унинг номи келиб чиққан. Иккинчи тармоқ тебранишлари оптик жиҳатдан фаол, яъни улар инфрақизил нурланишни ютиш ва чиқаришда қатнаша олади, шундан унинг номи келиб чиққан. Ҳақиқатан, агар кристалл элементар каттада иккита қарши иншорали нонлар бўлса, улар электрик диполдан иборат бўлиб, тебраниш жараёнида дипол momenti ўзгариб туради. Электродинамикада кўрсатилишича, ўзгарувчан моментли дипол нурланиш чиқара ва юта олади.

Б) Энг қисқа узунликдаги тўлқинлар ҳолида

$$\lambda = 2a, q = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$$

(2.22), (2.24) ифодаларнинг u'_n/u''_n учун муносабат ҳосил қилинади.

Унинг $\beta_1 = \beta_2$ бўлгандаги таҳлили қуйидаги натижаларни беради:

$$\begin{array}{ll} m''/m' \text{ ҳолда акустик тармоқда} & \left. \begin{array}{l} u'_n = 0, u''_n \neq 0, \\ u'_n = 0, u''_n \neq 0. \end{array} \right\} \\ m'/m'' \text{ ҳолда оптик тармоқда} & (2.31) \end{array}$$

Демак, энг қисқа $\lambda = 2a$ тўлқин ҳолида акустик тармоқда энгил атомлар ҳаракатсиз, оғирлари тебраниб туради, оптик тармоқда эса аксинча.

В) яна бир ҳолни, яъни $m' = m''$ ва $\beta_1 \gg \beta_2$ ҳолни кўрайлик. Юқоридагига ўхшаш таҳлил оқибатида бу ҳолда

$$\left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{ak} = 1 \text{ ва } \left(\frac{u'_n}{u''_n} \right) = -1. \quad (2.32)$$

Энг қисқа акустик тўлқинда, бу ҳолда атомлар бир хил фазада тебранади. Оптик тўлқинда эса қарши фазаларда тебранади. Биз олдин агар (2.9) дисперсия муносабати бажарилса, (2.7) ифода чопувчи тўлқин (2.6) тенглама ечими бўлишлигини кўрдик. Аммо (2.7) гармоник тўлқинлар бу занжирчадаги атомларнинг энг умумий ҳаракатини тавсифламайди. Бунинг учун (2.7) кўринишдаги мумкин бўлган барча тўлқинларнинг чизигий йиғиндис олиниши керак. Энг умумий ҳолда атомнинг силжиши

$$u_n = \sum_q \{ A_q e^{i(qan - \omega t)} + A_q^* e^{-i(qan - \omega t)} \} \quad (2.33)$$

кўринишда ифодаланиши керак. Агар G атомдан ташкил топган занжирча қаралса, у ҳолда:

$$u_n = \frac{1}{G} \sum_q \{ a_q e^{i(qan - \omega t)} + a_q^* e^{-i(qan - \omega t)} \} \quad (2.34)$$

Бунда $a_q = \sqrt{G} e^{-i\omega t}$.

Атомлар занжирчасининг кинетик энергияси $E_k = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^G u_n^2$, по-

тенциал энергияси $E_n = \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^G (u_n - u_{n-1})^2$. (2.34) ифодадан фойдаланиб занжирчанинг тўла энергиясини

$$E = E_k + E_n = 2m \sum_q \omega_q^2 a_q a_q^*$$

кўринишга келтирилади. $x_q = a_q + a_q^*$, $p_q = \frac{m\omega_q}{i} (a_q - a_q^*)$ белгилашлар киритсак,

$$E = \sum_q \left\{ \frac{1}{2m} p_q^2 + \frac{1}{2} m \omega_q^2 x_q^2 \right\}. \quad (2.35)$$

x_q ва $p_q = m\dot{x}_q$ катталиклар нормал координаталар ва уларга қўшма импульслар вазифасини бажаради. Демак, бир ўлчовли кристалл энг умумий ҳаракати тўла энергияси E нормал тебранишлар энергиялари йиғиндиси сифатида ифодаланади.

2.3 Уч ўлчовли мураккаб кристалл панжараси атомлари тебранишлари

Бир ўлчовли (чизигий) кристалл панжараси атомлари тебранишларининг асосий хоссалари фазовий панжара атомлари тебранишларига ҳам тегишлидир. Аммо фазовий панжара тебранишларига хос хусусиятлар мавжуд. Биз энди уч ўлчовли (фазовий) мураккаб кристаллни қарайлик. Унинг элементар катагида s та m_k ($k=1,2,\dots,s$) турли массаларга эга бўлган атомлар бўлсин. k -атомнинг n -элементар катакдаги вазияти

$$\vec{r}_n^k = \vec{a}_n + \vec{r}^k \quad (2.36)$$

бўлсин, бунда $\vec{a}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ — тўғри панжара вектори, \vec{r}^k - k - атомнинг элементар катак ичидаги вазиятини аниқловчи радиус-вектор. Шу k - атомнинг мувозанатий вазиятидан силжишини \vec{u}_n^k , унинг тўғри бурчакли координата системасидаги ташкил этувчиларини \vec{u}_{na}^k ($a = x, y, z$) деб белгилаймиз.

Кристалл ичида ажратиб олинган кўп G сонли зарраларни ўз ичига олган соҳанинг N элементар катагида $3sN$ та u_{na}^k силжишлар бўлади, силжишлар бўлмаганда $u_{na}^k = 0$, потенциал энергия E минимал (энг кичик) бўлади, яъни $\left(\frac{\partial E_{\text{ном}}}{\partial u_{na}^k} \right)_0 = 0$. Яна

$E_{\text{ном}}(u_{na}^k = 0) = 0$ деб ҳисоблаймиз. Бу ҳолда силжишлар функцияси бўлмиш $E_{\text{ном}}(u_{na}^k)$ потенциал энергияни u_{na}^k даражалари бўйича қаторга ёямиз:

$$E_{nom} = \frac{1}{2} \sum_{nn'kk'\alpha\beta} C_{\alpha\beta} \left(\frac{kk'}{nn'} \right) u_{na}^k u_{n'\beta}^{k'} + \frac{1}{6} \sum_{\substack{nn'n'' \\ kk'k'' \\ \alpha\beta\gamma}} C_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{kk'k''}{nn'n''} \right) u_{na}^k u_{n'\beta}^{k'} u_{n''\gamma}^{k''} + \dots, \quad (2.37)$$

бунда,

$$C_{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial^2 E_{nom}}{\partial u_{na}^k \partial u_{n'\beta}^{k'}} \right) u_{na}^k = 0, \\ C_{\alpha\beta\gamma} = \left(\frac{\partial^3 E_{nom}}{\partial u_{na}^k \partial u_{n'\beta}^{k'} \partial u_{n''\gamma}^{k''}} \right) \begin{cases} u_{na}^k = 0, \\ u_{n'\beta}^{k'} = 0, \\ u_{n''\gamma}^{k''} = 0. \end{cases}$$

Гармоник тақрибда, яъни атомлар ўзаро таъсир кучлари квази эластик деб ҳисобланган ҳолда (2.37) ёйилмада биригчи йиғиндидан бошқа ҳамма ҳадларни ташлаб юбориш керак:

$$E_{nom} = \frac{1}{2} \sum_{nn'kk'\alpha\beta} C_{\alpha\beta} u_{na}^k u_{n'\beta}^{k'}. \quad (2.37')$$

Мазкур соҳа атомлари кинетик энергияси йиғиндиси

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \sum_{nka} m_k (u_{na}^k)^2. \quad (2.38)$$

Квадратик (2.37) кўринишда ифодаланган E_{nom} дан сиғиш бўйича олинган ҳосила мос квази эластик кучни аниқлайди:

$$f_{na}^k = - \frac{\partial E_{nom}}{\partial u_{na}^k}.$$

Гармоник тақрибда қаралаётган атомларнинг классик ҳаракат тенгламалари, бинобарин,

$$m_k \frac{d^2 u_{na}^k}{dt^2} = - \frac{\partial E_{nom}}{\partial u_{na}^k} = - \sum C_{\alpha\beta} u_{n'\beta}^{k'} \quad (2.39)$$

кўринишда бўлиб ($n=1,2,3,\dots,N$; $k=1,2,3,\dots,s$; $=x,y,z$), улар $3sN$ та номаълум u_{na}^k учун $3sN$ та дифференциал тенгламалар системасини ташкил қилади. Бу ҳолда ҳам тенгламалар ечимини

$$u_{na}^k = \frac{1}{\sqrt{m_k}} A_{\alpha}^k(q) e^{i(qan - \omega t)} \quad (2.40)$$

чопувчи тўлқинлар кўринишида тасвирлаймиз.

$\frac{1}{\sqrt{m_k}} A_\alpha^k$ — турли атомлар хили учун турли бўлган $\frac{1}{\sqrt{m_k}} A^k$ — ком-

плекс амплитуда ташкил этувчилари, $\vec{q} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}_o$ — тўлқин вектор (\vec{n}_o - ясси тўлқинга нормалнинг бирлик вектори), $\omega = \omega(\vec{q}) = \omega_q$ - такрорийлик.

Бу масалани ечишдан келиб чиқадиган асосий натижаларга тўхталамиз:

А) Бир ўлчовли панжара тебранишлари ҳолидагидек, \vec{q} ва $\vec{q}' = \vec{q} + \vec{b}_x$ (бунда тескари панжара вектори $\vec{b}_x = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3$) векторлар тавсифлайдиган тўлқинлар бир бири билан айнандир, яъни

$$u_{n\alpha}^k(\vec{q}') = u_{n\alpha}^k(\vec{q}). \quad (2.41)$$

Буни \vec{a}_n ва \vec{b}_x векторлар ташкил этувчилари орасидаги боғланишлар асосида исботлаш осон. Демак, \vec{q} га боғлиқ бўлган барча катталиклар даврий ўзгаради, бунда $\vec{a}_n = \vec{a}_i$ ва $\vec{b}_x = \vec{b}_i$ кичик қийматларни қабул қилсак, $\vec{q}' \vec{a}_i = \vec{q} \vec{a}_i + 2\pi$ тенглик келиб чиқади. Демак, фазовий панжара тебранишларини таҳлил қилганда $\vec{q}' \vec{a}_i$ нинг қийматларини

$$-\pi \leq \vec{q}' \vec{a}_i \leq +\pi \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.42)$$

оралиқда қаралса бўлади. Бу учта тенгсизликлар q — фазодаги бирор ҳажми ифодалайди. Уни биринчи Бриллюэн зонаси дейилади.

Кубик кристалл учун ($a_1 = a_2 = a_3$; $\vec{a}_1 \perp \vec{a}_2, \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3, \vec{a}_1 \perp \vec{a}_3$) (2.42) тенгсизликлар учта

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_a \leq +\frac{\pi}{a} \quad (2.43)$$

шакли олади. Бу ҳолда биринчи Бриллюэн зонаси ҳажми $V_B = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ бўлади, бунда $V_o = a^3$ элементар катак ҳажми. Бошқа кристалл панжара учун қилинган ҳисоб ҳам худди шундай, яъни

$V_B = \frac{(2\pi)^3}{V_0}$ ифодани беради (албатта, V_0 — элементар катак

ҳажми турли панжаралар учун ҳар хил).

Б) (2.40) ечимларни (2.39) тенгламаларга қўйсак, номаълум A_α^k амплитудалар учун $3sN$ та бир жинсли чизигий тенгламалар системаси ҳосил бўлади. Унинг маънили ечимлари мавжуд бўлиши учун номаълумлар олдидаги кўпайтувчилардан тузилган аниқловчи (детерминант) нолга тенг бўлиши зарур.

Уни ечишдан ω^2 га нисбатан $3s$ даражали тенглама ҳосил бўлади. Бу тенгламанинг $3s$ ечимига мос равишда фазовий панжара атомлари тебранишларининг $3s$ тармоғи мавжуд бўлади.

Бу тармоқларнинг фақат 3 таси акустик, $3s-3$ таси оптик тармоқлар бўлади.

Агар кристаллнинг элементар катагида 1 атом бўлса, фақат учта акустик тармоқ мавжуд бўлади, агар элементар катакда 2 атом ($s=2$) бўлса, 3 та акустик ва 3 та оптик тармоқ бўлади ва ҳоказо.

Ҳар бир тармоқдаги тўлқинларнинг бири буйлама (1 ёки L ҳарфи билан белгиланади), иккитаси кўндаланг (t ёки T ҳарфи билан белгиланади) бўлади.

В) \bar{q} нинг функцияси бўлмиш ω_j ҳам даврий ўзгаради:

$$\omega_j(\bar{q} + \bar{b}_r) = \omega_j(\bar{q}) \quad (2.44)$$

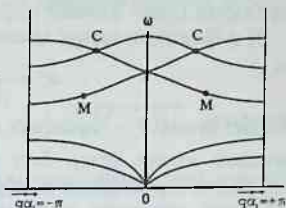
Бунда λ_j — ихтиёрий тармоқ белгиси.

Г) ω такрорийлик \bar{q} нинг жуфт функцияси

$$\omega_j(-\bar{q}) = \omega_j(\bar{q}) \quad (2.45)$$

Бу ω_j ифодаларига \bar{q} нинг фақат жуфт даражалари кирадн демакдир.

Д) Бриллюэн зонасидаги ҳар бир тебранишлар тармоғи учун $\omega_j(\bar{q}) = const$ сиртлар яшаш мумкин. Бу бир хил такрорийликни ёки бир хил энергияли $\hbar\omega_j(q) = E(q)$ сиртларнинг тузилиши кристалл тўғри панжараси симметриясига муҳим даражада боглиқ.



2.7-чизма. Уч улчоqli панжара тебранишлари тармоқлари.

Е) 2.7- чизмадан кўринишича, O, A, C ва C' нуқталарда айниш мавжуд, яъни бу нуқталарда бир неча тармоқлар кесишади. Яна шуни айтиш керакки, $\omega_j(\bar{q})$ нинг экстремумлари Бриллиуээн зонаси маркази ва чегараларида ҳам, унинг баъзи ички нуқталарида (2.7- чизмада M ва M' нуқталарда) ҳам ўринли бўлиши мумкин.

Ж) Бу ҳолда ҳам кристалл асосий соҳаси сиртидаги чегаравий шартларни Борн- Карман шартлари билан алмаштирилади.

З) q -фазонинг кичик ҳажмига тўғри келган тебранишлар сони

$$dz = \frac{V}{(2\pi)^3} dV_q \quad (2.46)$$

бўлади, бунда V — кристалл соҳаси ҳажми, $dV_q = dq_x dq_y dq_z$ эса q -фазодаги кичик ҳажм. Бир тармоқдаги тебранишлар тўла сони $z=N$, барча тармоқлардаги тебранишлар тўла сони $z=3sN$, яъни асосий соҳа атомлари эркинлик даражалари сонига тенг (N — соҳадаги элементар ячейкалар сони, бир атомнинг эркинлик даражаси 3 та деб ҳисобланади).

2.4. Изотроп континуум тақрибда кристалларда тебранишлар ва тўлқинлар

Мазкур бобнинг муқаддимасида айтилганидек, кристалл панжара динамикасини тадқиқлашда иккинчи услуб — бу континуум тақриб бўлиб, унинг асосида қаттиқ жисм бир бутун эластик тўташ муҳитдан иборат деган фараз ётади. Бу тақриб кристалл панжараси доимийсидан анча катта бўлган, яъни кристаллнинг атомлардан узилишли тузилишини ҳисобга олмаса бўладиган узунликдаги тўлқинлар ҳолида энг яхши натижалар беради.

Биз қуйида ионлар кристаллида узун акустик ва узун оптик тўлқинлар ҳолларини кўриб чиқамиз:

А) Узун акустик тўлқинлар ҳолида континуал тақриб эластиклик назариясини қўллашга баробардир. Агар муҳитнинг r нуқтасида t вақтда силжишни $u(r, t)$ деб белгиласак, бир жинс, изотроп, эластик континуум учун ҳажмий кучлар йўқлигидаги ҳаракат тенгламаси

$$\rho \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t^2} = (M + \Lambda) \text{grad div } \bar{u} + M \nabla^2 \bar{u}, \quad (2.47)$$

бунда, M ва Λ — Λ амэ доимий коэффицентлари, ρ — бир жинсли континуумнинг доимий зичлиги (бу тенглама ҳам бирлиги учун ёзилган, унинг ўнг томони эластиклик кучларини ифолайди). Эластиклик назариясидан маълумки, $\operatorname{div} \bar{u} = \theta$ — ҳамнинг \bar{r} нуқтада $\Delta V/V$ нисбий ўзгариши (қисилиши), $\frac{1}{2} \operatorname{rot} \bar{u} = \bar{\varphi}$ эса ўша нуқтада ҳам элементининг бир бутун сифатида бурилиш бурчаги. (2.47) тенгламанинг ҳар икки томонида дивергенция (div) амалини бажарсак, θ қисилиш учун

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} = V_i^2 \nabla^2 \theta \quad (2.48)$$

тўлқин тенглама оламиз, бунда $V_i = \sqrt{(2M + \Lambda)/\rho}$ қисилиш тўлқинлари тезлиги.

(2.47) тенгламанинг ҳар икки томонида ротор (rot) амалини бажарсак, бурилиш бурчаги φ учун

$$\frac{\partial^2 \bar{\varphi}}{\partial t^2} = V_i^2 \nabla^2 \bar{\varphi} \quad (2.49)$$

тўлқин тенглама ҳосил қиламиз, бунда $V_i = \sqrt{\frac{M}{\rho}}$ бурилиш тўлқинлари тезлиги. $V_i \rangle V_i$ эканлиги равшан, чунки биринчи ҳолда иккинчи ҳолга нисбатан эластиклик қаршилиги каттадир.

Шу ерда таъкидлаш керакки, Юнг модули ёки бўйлама эластиклик модули E билан M ва Λ орасида (изотроп моддада) қуйидаги боғланиш бор: $E = \frac{M(3\Lambda + 2M)}{M + \Lambda}$. Бошқа эластиклик

модуллари ҳам ўзаро боғлиқ, моддада мустақил эластиклик модуллари иккита (M ва Λ ёки E ва ν , кейинги модулни Пуассон коэффиценти дейилади: $\nu = \frac{\Lambda}{2(M + \Lambda)}$. У намуна кўндаланг

ўлчамининг нисбий ўзгаришини бўйлама ўлчами нисбий ўзгаришига нисбатини билдиради.)

х ўқи бўйлаб тарқалаётган ясси тўлқинни қарайлик.

$$\bar{u} = \bar{A} \sin(\omega t - qx). \quad (2.50)$$

Бундан:

$$\theta = \operatorname{div} \bar{u} = -A_x(q) \cos(\omega t - qx). \quad (2.51)$$

$$\text{ва } \vec{\varphi} = \frac{1}{2} \text{rot} \vec{u} = -A_1 \vec{j}_0 \left(\frac{q}{2} \right) \cos(\omega t - qx) + A_2 \vec{k}_0 \left(\frac{q}{2} \right) \cos(\omega t - qx), \quad (2.52)$$

бундаги \vec{j}_0 ва \vec{k}_0 — y ва z ўқлар бирлик векторлари. (2.51) дан кўри-нишича, қисилиш тўлқинлари қўндаланг тўлқинлардир.

(2.48) тенглама ва (2.49) тенгламанинг $\vec{\varphi}$ ташкил этувчилари учун кўриниши бир хил, шунинг учун (2.48) тенгламани қараб чиқиш кифоя. θ қисилиш тўлқинларини L қиррали кубда қараймиз. x, y, z координаталар ўқларини кубнинг қирралари бўйлаб йўналтирамиз. Чегаравий шартларни барча 6 та куб ёқида ($x=y=z=0$; $x=y=z=L$) $\theta=0$ бўлсин деб танлаймиз. (2.48) ечимини

$$\theta = A \sin(\omega t) \sin(ax) \sin(by) \sin(cz) \quad (2.53)$$

кўринишда қидирамиз. (2.53) ни (2.48) га қўйсақ,

$$\omega = v \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}. \quad (2.54)$$

Чегаравий шартларни қаноатлантириш учун

$$aL = n_1\pi, \quad bL = n_2\pi, \quad cL = n_3\pi \quad (2.55)$$

деб олиш керак, бунда n_1, n_2, n_3 — бутун мусбат сонлар ёки нол; (2.55) ни (2.54) ифодага қўямиз:

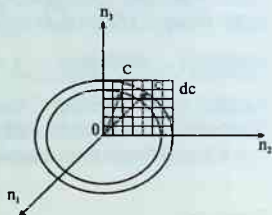
$$\omega = \frac{\pi v}{L} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \quad (2.56)$$

n_i сонларнинг ҳар бир учлигига муайян ω такрорийликли битта нормал тебраниш мос келади.

Агар n_1, n_2, n_3 сонлар катта бўлса, тебранишлар тўлқин узунлиги L дан анча кичик бўлади, бу ω такрор-рийлик N сонларга худди узлуксиз равишда боғлангандай бўлади.

$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = C^2$ белгилаш кирит-сак, $\omega = \frac{\pi v}{L} C$. 2.8-чизмада тасвир-

ланган куб панжара (бунда фақат (n_2, n_3) текисликдаги тугунлар кел-тирилган) тугунларининг ҳар бирига



2.8-чизма.

учта n_1, n_2, n_3 сон туғри келали. Аммо панжаранинг ҳар бир туғунига битта нормал тебраниши мос тушали. n_i сонлар кагга бўлгани ҳолда $\omega, \omega + d\omega$ такрорийлик оралиғига туғри келган тебранишлар сонини аниқлаймиз. Бу сон координат окантидаги $(C, C+dC)$ сферик қап ламдаги туғунлар сонига тенг. Демак, $(\omega, \omega+d\omega)$ оралиққа мос келган бўлсама тебранишлар сонини

$$g(\omega)d\omega = \frac{4\pi C^2 dC}{8} = \frac{V}{2\pi^3 v^3} \omega^2 d\omega. \quad (2.57)$$

(2.49) тенгламада \vec{p} векторинини ташкил этувчиларига нисбатан ҳам бу ҳисоб туғри, аммо бунда иккита ташкил этувчи бўлгани учун тебранишлар сонини ҳам икки марта ортиқ:

$$g_i(\omega)d\omega = \frac{2V}{2\pi^3 v_i^3} \omega^2 d\omega. \quad (2.58)$$

Такрорийликлар тўла тақсимооти функцияси

$$g(\omega) = g_1(\omega) + g_2(\omega) = \frac{3V}{2\pi^3 v_0^3} \omega^2. \quad (2.59)$$

бунда

$$\frac{1}{v_0^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{v_1^3} + \frac{2}{v_2^3} \right). \quad (2.60)$$

v_0 - ўртача товуш тезлиги.

Б) Энди континуал тақрибда ионлар кубик кристаллда узун оптик туғунлар тарқалиши масаласини қарайлик. Фараз қиламиз: ионлар кубик кристаллда ҳар бир ячейкасида $\pm e^*$ эффектив зарядли m_+ ва m_- массали икки турли исмли ионлар бор бўлсин. Узун оптик тебранишлар соҳасидаги ионларнинг барча ячейкаларидаги ҳаракати бирдан, шунинг учун бир ячейкадаги ионлар ҳаракатини текшириши кифоя.

\vec{u}_+ ва \vec{u}_- мос исморали ионлар силжини бўлса, у ҳолда

$$m_+ \frac{d^2 \vec{u}_+}{dt^2} = -\beta(\vec{u}_+ - \vec{u}_-) + e^* \vec{E}_+, \quad (2.61)$$

$$m_- \frac{d^2 \vec{u}_-}{dt^2} = -\beta(\vec{u}_- - \vec{u}_+) + e^* \vec{E}_-. \quad (2.62)$$

Бунда \vec{E}_\pm — ионга таниқи майдон ва кристалднинг бошқа ионлари томонидан таъсир этувчи эффектив электрик майдон. β -кoeffи

эластик куч коэффициенти. Юқоридаги икки тенгламани бир-биридан айирсак,

$$m_r \frac{d^2 \bar{s}}{dt^2} = -\beta \bar{s} + e^* \bar{E}_c. \quad (2.63)$$

Бунда, $\bar{s} = \bar{u}_+ - \bar{u}_-, m_r^{-1} = m_+^{-1} + m_-^{-1}$.

Электродинамикадан маълумки, ионлар кубик кристаллида эффектив майдон

$$\bar{E}_c = \bar{E} + \frac{4\pi}{3} \bar{P}, \quad (2.64)$$

бунда \bar{E} — диэлектрикдаги ўртача майдон, қутбланиш вектори

$$\bar{P} = N_0 [e^* \bar{s} + \alpha \bar{E}_c], \quad (2.65)$$

N_0 — кристаллнинг бирлик ҳажмидаги ячейкалар сони $\alpha = \alpha_+ + \alpha_-$ — электрон қутбланувчанлик. (2.64) ифодани (2.65) га қўйсак,

$$\bar{P} = N_0 \frac{e^* \bar{s} + \alpha \bar{E}}{1 - \frac{4\pi N_0}{3} \alpha} \quad (2.66)$$

Бевосита ўлчанмайдиغان α катталикини чиқариб ташлаш учун электрик индукция вектори ифодаси $\bar{D} = \bar{E} + 4\pi \bar{P} = \epsilon \bar{E}$ дан фойдаланамиз, бундан $\bar{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \bar{E}$. Юқори такрорийликли майдонда ($\omega \rightarrow \infty$) ионлар унинг кетидан улгуриб боролмайди, шунинг учун $s \rightarrow 0$ бўлади. Бу ҳолда,

$$\alpha = \frac{\epsilon_\infty - 1}{\frac{4\pi N_0}{3} (\epsilon_\infty + 2)}, \quad (2.67)$$

ва

$$\bar{P} = N_0 \frac{e^* (\epsilon_\infty + 2)}{3} \bar{s} + \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \bar{E} \quad (2.68)$$

(2.64) ва (2.68) ифодалардан фойдалансак,

$$m_r \frac{d^2 \bar{s}}{dt^2} = -m_r \omega_0^2 \bar{s} + \frac{e^* (\epsilon_\infty + 2)}{3} \bar{E}, \quad (2.69)$$

бундаги

$$\omega_0^2 = \left(\frac{\beta}{m_r} \right) - \frac{4\pi N_0 e^{*2} (\epsilon_{\infty} + 2)}{9m_r} \quad (2.70)$$

«Нормаланган» четланиш $\bar{w} = \sqrt{N_0 m_r} \bar{s}$, статик диэлектрик доимий $\epsilon_{\infty} (\omega \rightarrow 0)$, яъни $\epsilon_{\infty} - \epsilon_{\infty} = \frac{N_0 e^{*2}}{m_r} \frac{4\pi(\epsilon_{\infty} + 2)^2}{9\omega_0^2}$ (2.71) кiritилса, (2.69) тенглама

$$\frac{d^2 \bar{w}}{dt^2} = -\omega_0^2 \bar{w} + i\omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{4\pi}} \bar{E} \quad (2.72)$$

кўринишга келади ва

$$\bar{P} = \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{4\pi}} \bar{w} + \frac{\epsilon_{\infty} - 1}{4\pi} \bar{E} \quad (2.73)$$

бўлади.

Ионлар ҳаракатини таҳлил қилиш учун

$$\bar{w} = \bar{w}_l + \bar{w}_t \quad (2.74)$$

ва

$$\text{div} \bar{w}_l = 0, \text{rot} \bar{w}_l = 0 \quad (2.75)$$

деб оламиз. Бу ҳолда (2.72) ни

$$\frac{d^2}{dt^2} (\bar{w}_l + \bar{w}_t) = -\omega_0^2 \bar{w}_t - \omega_0^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{\infty}} \bar{w}_l \quad (2.76)$$

кўринишга келтириб, уни иккитага ажратамиз:

$$\frac{d^2 \bar{w}_l}{dt^2} = -\omega_0^2 \bar{w}_l \quad (2.76')$$

$$\frac{d^2 \bar{w}_t}{dt^2} = \omega_0^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{\infty}} \bar{w}_t \quad (2.76'')$$

Агар \bar{w}_l ва \bar{w}_t ни $\bar{A} \exp[i(q\bar{r} - \omega t)]$ ясен тўлқин кўринишида тасвирласак $\omega_l = \omega_0$ ва $\omega_t = \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_{\infty}} \right) \omega_0$ келиб чиқади. Иккинчи томондан, (2.75) шартларга кўра,

$$\left. \begin{aligned} \text{div} \bar{w}_l &\ll \bar{A} \cdot \bar{q} = 0, \\ \text{rot} \bar{w}_l &\ll \left[\bar{A}, \bar{q} \right] = 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.77)$$

Бундан $A, \perp q$ (солиноидал \bar{w} , тўлқин кўндаланг), $\bar{A}, \parallel \bar{q}$ (потенциал тўлқин бўйлама) эканлигини кўрамли.

$$\omega_i / \omega_l = \sqrt{\epsilon_n / \epsilon_v} \quad (2.78)$$

нибатни Линден - Сакс - Теллер муносабати дейилади. ϵ_n, ϵ_v бўлганидан бўйлама тўлқинлар такрорийлиги ω_l кўндаланг тўлқинларининг ω_l дан катта. Тажрибада ω_l ни ўлчаш осон. шунинг учун (2.78) нфодадан ω_l ни аниқлаш учун фойдаланиш мумкин.

2.5. Кристалл панжараси тебранишларининг квантланиши. Фононлар

Кристалл атомлари тебранишларини бошқа усул билан, айнан корпускуляр (зарравий) нуқтаи назардан қараб чиқиш ҳам мумкин. Тўлқинларнинг зарравий хоссалари кристалл атомларининг ҳар қандай такрорийликдаги тебранишлари энергиясининг энг кичик ўлчиш (кванти) мавжуд булишида намоён бўлади. Бу хосса кристалл панжарасининг элементар зарралар билан ўзаро таъсири жараёнида яққол кўринади. Бу жараёнларда кристалл панжараси ўз тебранишлари энергиясининг бир квантини (баъзан кетма-кет бир неча квантни) беради ва шу квант миқдорича энергияни олади. Демак, кристалл панжараси тебранишлари энергияси квантланган бўлади. Худди ёруғлик тўлқинини ёруғлик квантлари — фотонлар оқими сифатида тасвирланганига ўхшаш, кристалл панжараси тебранишлари энергияси квантига ва унга мос квази импульсга эга бўлган квази зарра — фонон тушунчаси киргизилган. Фонон сўзи товуш зарраси деган маънони англатади. Фононнинг энергияси $\epsilon_q = h\omega_q$ бўлиб, унинг квази импульси $\vec{p}_q = h\vec{q}$ ва у товуш теълигида ҳаракат қилади деб ҳисобланади. \vec{p}_q векторининг квази импульс деб айтилишинини боиси шуки, биринчидан, ҳар қандай квази зарралар каби фононлар ҳақиқий зарралардан ташкилланган системалардагина мавжуд бўлади. Фононлар фақат кристаллардагина мавжуд бўлиб, улар кристаллдан (масалан, буғлиққа) чиқиб кета олмайди. Ҳақиқий зарралар — электронлар, атомлар эса кристаллдан чиқиб кетиб, ундан ташқарида

мавжуд бўла олади. Иккинчидан, квази зарралар тўқнашганда квази импульс сақланмайди. Фононлар эса ўзаро тўқнашиб йўқ бўлади, бунда тўқнашган фононлардан энергияси фарқ қиладиган, бошқа такрорийликли янги фонон туғилади.

Эркин зарранинг энергияси зарра импульси йўналишига боғлиқмас, квази зарранинг энергияси эса (кристаллда атомлар даврий жойлашганлиги туфайли) квази импульсга даврий боғланган.

Фононлар спин моментлари бўлмаган зарралар сифатида Бозе-Эйнштейн статистикасига бўйсунди. Бинобарин, фононларнинг ω_q такрорийликли, $\hbar\omega_q$ квант энергияли ҳолатдаги сони Планк ифодаси билан ифодаланди:

$$N_q = 1 / \left[\exp \frac{\hbar\omega_q}{kT} - 1 \right]. \quad (2.79)$$

Шу ҳолатдаги барча фононлар энергияси:

$$E_q = \hbar\omega_q N_q = \hbar\omega_q / \left[\exp \frac{\hbar\omega_q}{kT} - 1 \right]. \quad (2.80)$$

Одатда ушбу энергияга яна нол энергия деб аталадиган ҳад қўшилади, унда

$$E_q = \frac{\hbar\omega_q}{2} + \frac{\hbar\omega_q}{\left[\exp \frac{\hbar\omega_q}{kT} - 1 \right]}. \quad (2.81)$$

Кристалл атомлари тебранишлари такрорийликлари оралигини ёки фононларнинг энергетик спектрини аниқлайлик. Бунда тебранишлар такрорийлиги $\omega_q = 0$ дан бошланиб, уларнинг энг катта такрорийлиги ω_m мавжуд, бунда тебраниш такрорийликлари сони (танланган тармоқ учун) N атомдан иборат кристаллда $3N$ га тенг бўлади. Такрорийликлар тақсимоти zichлиги учун (2.59) ифодани қабул қилсак, у ҳолда

$$\int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega = 3N. \quad (2.82)$$

Максимал ω_m такрорийлик ўрнига тавсифий температура тушунчасини киритилади:

$$\theta = \hbar\omega_m/k. \quad (2.83)$$

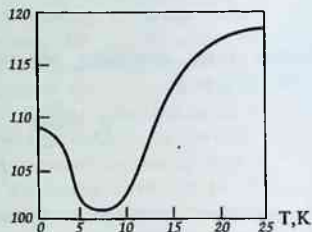
Бу θ температурани Дебай температураси дейилади. Максимал тебранишлар такрорийликлари ω_m ва бинобарин θ турли қаттиқ жисмлар учун турличадир.

2.1 – жадвал

Кристаллар	Тузилиши	θ , К
Мис	ё.м.куб	365
Алюминий	ё.м.куб	438
Натрий	ҳ.м.куб	164
Магний	Гексагон	290
Fe	ҳ.м.куб	478
Ni	ё.м.куб	446
Ge	Олмос	377
Si	Олмос	674

Дебай температураси тушунчаси қаттиқ жисм физикасининг кўп масалаларида фойдаланилади.

Таърибанинг кўрсатишича, θ Дебай температураси мутлақ T температурага боғлиқ равишда бир мунча ўзгаради. Кўпчилик кристаллар учун бу боғланиш унча сезиларли эмас, аммо баъзи ҳолларда у сезиларли бўлади. Масалан, металл In учун келтирилган 2.9-чизмада паст температуралар



2.9-чизма. Дебай θ температурасининг мутлақ T га боғланиши.

соҳасида Дебай температураси $\theta(T)$ ҳатто минимумга эга бўлади. θ эластиклик доимийларига боғлиқ. Кучли атомлараро таъсирли (олмос) кристалларда θ нинг қиймати юқори.

θ нинг ҳар хил усул билан аниқланган қийматлари ҳам бири-бирдан фарқ қилади.

Дебай температураси юқори ($T > \theta$) ва паст ($T < \theta$) температура соҳаларини ажратиб туради. Юқори температураларда мумкин

бўлган барча такрорийликдаги тебранишлар мавжуд бўлади, паст температураларда эса T га қараб муайян оралиқдаги тебранишларгина уйғонган бўлади, T пасайиб борган сайин уйғонган тебранишлар оралиғи торайиб (кичик такрорийликлар томон) боради. Бу қаттиқ jismlar хоссаларини аниқлашда муҳимдир.

Масалалар ва саволлар

1. Кристалл панжараси доимийси $a = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\lambda = 10a$ бўлган ҳол учун, чизигий содда панжара учун ω такрорийликни ҳисобланг.

2. $a = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\beta = 3 \text{ м}^2 \cdot \text{кг}/\text{с}^2$, $m = 10^{-26} \text{ кг}$ ҳолда чизигий панжарада товуш тезлиги қандай бўлади?

3. $q = \pi/2a$ бўлганда фазавий ва гуруҳий тезликлар нисбатини аниқланг?

4. $\beta_1 = \beta_2 = \beta$, $m' = m'' = m$ бўлганда икки хил атомли панжарада атомлар тебранишлари такрорийлиги қандай ифодаланани?

5. Атомлар тебранишлари тармоқлари номлари қандай асосда келиб чиққан?

6. Уч ўлчовли (фазовий) кристалл панжараси ҳолида тебранишларни гармоник тақрибда қараш учун потенциал энергия кўриниши қандай бўлади?

7. Биринчи Бриллюэн зонаси ҳажмини аниқланг. Кубик панжара учун $a = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ деб ҳисобланг?

8. Атомистик ва континуал услублар тафовутини тушунтиринг.

9. Фононларнинг фотонлардан тафовутлари қандай?

10. Дебай температураси нимани ифодалайди? У T температурага боғлиқми?

III БОБ

ФИЗИК СТАТИСТИКА ҚОНУНЛАРИ

Жуда кўп сонли зарралардан (молекулалар, атомлар, электронлар ва ҳоказолардан) таркибланган системалар бўлмиш макроскопик жисмларнинг хоссаларини таркибидаги зарралар хоссалари ва ўзаро таъсири асосида ўрганадиган физика бўлимини *статистик физика* дейилади.

Қаттиқ жисмлар жуда кўп микрозарралардан тузилганлиги маълум. Шунинг учун қаттиқ жисм физикасини ўрганиш давомида статистик қонуниятлар муҳим ўрин тутди, бинобарин, улар ҳақида, ҳеч бўлмаганда, асосий маълумот билан танишиш албатта зарур.

Кўп зарралардан таркибланган система зарраларининг ҳар бир вақт momentiдаги координата ва тезликларини билиш амалда бажариб бўлмайдиган масала бўлибгина қолмасдан, бундай маълумот макросистема хоссаларини аниқлаш имконини бермайди.

Бундай системаларни тадқиқлашда эҳтимоллик тушунчасига асосланган статистик қонуниятлар билан иш кўрилади. Эҳтимоллик тасодифий ҳодисаларга (воқеаларга) тегишли бўлади. Масалан, идеал газ молекулаларининг тўқнашишлари ва унинг айна пайтда қандай тезликка (импульсга, энергияга) эга бўлишлиги тасодифий воқеадир. Тасодифий воқеалар мутайян эҳтимоллик билан юз беради. Бирор катталиқнинг бирор сон қийматига эга бўлишлиги тасодифий воқеа бўлади. Бундай катталиқларни тасодифий катталиқлар дейилади. Молекуланинг тўқнашишини тасодифий воқеа дедик, бунда унинг тезлиги ҳам тасодифан ўзгаради, демак тезлик тасодифий катталиқдир.

Баъзи бир физик катталиқлар тасодифий бўлгани ҳолда узлуксиз ёки узилишли қийматлар спектрига эга бўлиши мумкин.

Статистик назариялар асосан тасодифий воқеаларнинг ўзини эмас, балки уларни тавсифлайдиган тасодифий катталикларни тадқиқ қилади.

Бирор тасодифий воқеа N та синовда n_i марта юз берса, математик эҳтимоллик

$$W_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i}{N}, \quad (3.1)$$

кўринишда ифодаланади.

Физикада тасодифий катталик кўпинча вақт ўтиши билан ўзгариб боради. У ҳолда системанинг бирор ҳолатда бўлишлик эҳтимоллиги

$$W = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{T}, \quad (3.2)$$

бунда T — кузатиш тўла вақти, Δt — системани мазкур ҳолатда бўлиш вақти.

Эҳтимоллик назариясида, статистикада тақсимот функцияси тушунчаси марказий ўрин тутади.

Тасодифий катталик бир-бирига яқин жуда кўп қийматларга (узлуксиз спектрга) эга бўлиши мумкин. Бу ҳолда шу катталикнинг мумкин бўлган қийматларининг қандайдир оралигидаги қийматларга эга бўлиш эҳтимоллиги ҳақида гапирish мумкин. Масалан, x катталикнинг (молекула координатасининг) x , $x+\Delta x$ оралиқда бўлиш эҳтимоллиги $\Delta W(x)$ орқали белгиланади. Агар бу эҳтимоллик чексиз кичик dx оралиқда қаралса, уни $dW(x)$ орқали белгиланади. $dW(x)$ эҳтимоллик x нинг қиймати функцияси $f(x)$ бўлади ва dx оралиққа пропорционал бўлади:

$$dW(x)=f(x)dx. \quad (3.3)$$

Демак, мазкур тасодифий катталикнинг эҳтимолликларининг барча қийматлари тақсимотини $f(x)$ функция тавсифлайди, уни тақсимот функцияси ёки эҳтимоллик зичлиги дейилади:

$$f(x)=dW(x)/dx \quad (3.4)$$

Бу тақсимот функциясининг турли ҳоллардаги кўринишини аниқлаш статистик физиканинг асосий вазифасидир.

Тасодифий катталикнинг барча имконий қийматлари эҳтимолликлари йиғиндиси (интеграл) ишончли воқеа эҳтимоллигига, яъни 1 га тенг бўлади:

$$\sum_i W_i(x) = 1 \quad \text{ёки} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1 \quad (3.5)$$

Бу ифодани нормалаш (меъёрлаш) шарти дейилади.

Тасодифий катталикнинг ўртача қийматларини аниқлаш жуда муҳим масала, чунки статистика ҳисоблаб чиқадиган ўртача катталиклар термодинамик (макроскопик) системалар ҳолатини аниқлайдиган катталикларга тенг бўлади. Шу тарзда статистик физика термодинамик катталикларнинг физик маъносини тунунтиради.

3.1. Тасодифий катталикларнинг ўртача қийматлари

Тасодифий x катталик N та синовда (кузатишда) w_1 эҳтимоллик билан n_1 марта x_1 қийматни, w_2 эҳтимоллик билан n_2 марта x_2 қийматни ва ҳоказо, ниҳоят, w_k эҳтимоллик билан n_k марта x_k қийматни оладиган бўлсин. У ҳолда N та синовда x тасодифий катталик оладиган қийматлар йиғиндиси

$$x_1 n_1 + x_2 n_2 + \dots + x_k n_k,$$

бир синовга тўғри келадиган ўртача қиймат

$$\bar{x} = \frac{x_1 n_1 + x_2 n_2 + \dots + x_k n_k}{N} \quad (3.6)$$

N катта бўлса, \bar{x} бирор тайинли лимитга (чексизлик қийматга) интилади:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{x} = x_1 \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_1}{N} + x_2 \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_2}{N} + \dots + x_k \quad (3.7)$$

Одатда N жуда катта деб ҳисобланиб, ўртача қиймат

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^k x_i w_i \quad (3.7^1)$$

кўринишда ифодаланади.

Агар тасодифий катталик (масалан, газ молекуласи теъниги) узлуксиз ўзгарадиган бўлса (3.7¹)даги ишқиди интеграл билан алмаштирилади:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x dw(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx. \quad (3.8)$$

x тасодифий катталикнинг квадрати ўртачаси қиймиди инфодалар буйича топилади:

$$\overline{(x^2)} = \sum_{i=1}^k x_i^2 w_i, \quad \text{ёки} \quad \overline{(x^2)} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x) dx. \quad (3.9)$$

Шунингдек, x нинг $F(x)$ функцияси ўртачаси ҳам ҳисобланиши мумкин:

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \sum_{i=1}^k F(x_i) w_i \quad \text{ёки} \\ \bar{F} &= \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) f(x) dx \end{aligned} \quad (3.10)$$

Жуда кўп ҳолларда ўртача қийматдан четланишларни қараш керак бўлади. Аммо, ўртача четланиш ҳамма вақт нол қиймат беради:

$$\overline{(x - \bar{x})} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x}) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx - \bar{x} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = \bar{x} - \bar{x} = 0. \quad (3.11)$$

Ўртачадан четланиш квадратининг ўртачасини тасодифий катталикнинг дисперсияси дейилади:

$$\overline{\Delta x^2} = \sum_{i=1}^k (x_i - \bar{x})^2 w_i, \quad \text{ёки} \quad \overline{\Delta x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 f(x) dx. \quad (3.12)$$

Бу инфоданинг иккаласи ҳам

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (3.12')$$

кўринишга келади.

Дисперсиядан олинган квадрат яддияни, физик катталиклар қаралганда, флукутация дейилади:

$$\sqrt{\Delta x^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^k (x_i - \bar{x})^2 w_i}, \quad \text{ва} \quad \sqrt{\Delta x^2} = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 f(x) dx}. \quad (3.13)$$

3.2. Тақсимот функциялари мисоллари

Статистиканинг асосий вазифаларидан бири тасодифий катталиклар тақсимот функцияларини аниқлашдир. Биз бир неча мисоллар билан чегараланимиз.

1. *Пуассон тақсимоти.* Бу тақсимот, масалан, мазкур ҳажмдаги молекулалар сони ёки муайян вақтда буғланиб кетган зарралар миқдорини тасвирлайди. Унинг кўриниши:

$$w(x) = (a^x / x!) e^{-a}. \quad (3.14)$$

Бундаги a тасодифий x катталикнинг ўртача \bar{x} қийматларини ифодаладиган ўзгармас сон: $a = \bar{x}$.

2. *Экспоненциал тақсимот.* Бундай тақсимот, масалан, радиоактив парчаланиш, релаксацион ҳодисалар, молекулалар сонининг баландлик бўйича ўзгаришини текширилганда ўринли бўлади. Унинг кўриниши:

$$f(x) = \text{const} e^{-\alpha x} \quad (0 \leq x < \infty) \quad (3.15)$$

Нормалаш шартидан $\text{const} = \alpha$, бинобарин,

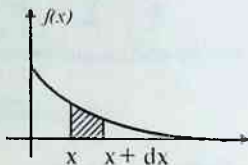
$$f(x) = \begin{cases} \alpha e^{-\alpha x}, & (0 \leq x < \infty \text{ да}); \\ 0 & (x, -\infty < x < 0 \text{ да}), \end{cases} \quad (3.15^1)$$

Бундай тақсимот учун $\bar{x} = \frac{1}{\alpha}$, шунинг учун

$$f(x) = \frac{1}{\bar{x}} e^{-\frac{x}{\bar{x}}} \quad (3.15^2)$$

3. *Гаусс тақсимоти.* Бу тақсимот хатоликлар назариясида, газда тезликлар проекциялари тақсимланишида, броун ҳаракатида учрайди. Унинг кўриниши:

$$f(x) = \text{const} e^{-\beta x^2}. \quad (3.16)$$



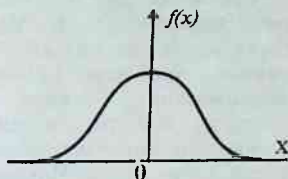
3.1-чизма Экспоненциал тақсимот графиги.

Нормалаш шарти $\text{const} = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}$ ни, ўртачалаш $\overline{x^2} = \frac{1}{2} \beta$ қийматларни беради ва узил-кесил Гаусс тақсимоти

$$f(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi x^2}} e^{-\frac{x^2}{x^2}} \quad (3.16')$$

кўринишни олади.

4. Делта - функция. $\delta(x-x_0)$ кўринишда белгиланадиган бу функция $x=x_0$ нуқтадан бошқа барча нуқталарда нолга тенг ва 1 га нормаланган.



3.2-чизма. Гаусс тақсимоти графиги.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) dx = 1, \quad (3.17)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(x) \delta(x - x_0) dx = F(x_0). \quad (3.18)$$

Бунда

$$f(x) = \delta(x - x_0). \quad (3.19)$$

Бу кўрилганлардан бошқа функциялар ва тақсимот қонунлари математика ва физикада кўп учрайди.

3.3. Бир неча тасодифий катталиклар учун тақсимот функцияси

Учта x, y, z мустақил тасодифий катталиклнинг бир вақтда dx, dy, dz оралиқларда бўлиш эҳтимоллиги

$$dW(x, y, z) = dW(x) dW(y) dW(z) = f(x) f(y) f(z) dx dy dz, \quad (3.20)$$

тақсимот функцияси

$$f(x, y, z) = f(x) f(y) f(z) = \frac{dW(x, y, z)}{dx dy dz}, \quad (3.21)$$

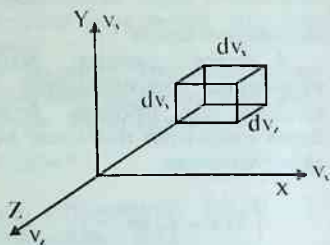
n та мустақил тасодифий катталиклар учун тақсимот функцияси n -ўлчовли

$$f(x, y, \dots, t) = f(x) f(y) \dots f(t) \quad (3.22)$$

бўлади. Бу функциялар учун олдингидек нормалаш шarti ёзилади, ўртача катталикларни топиш қоидалари ўринли бўлади.

3.4. Максвелл тақсимоти

Статистик физика тарихида биринчи бўлиб Максвелл идеал газ молекулаларининг тезликлар бўйича тақсимотини келтириб чиқарган. Сўнгра, Болцман бирор потенциал майдондаги идеал газни қараб, Максвелл тақсимотини бу ҳолга тадбиқлаган. Бу тақсимотлардан айрим ҳолларда қаттиқ жисм физикасида ҳам самарали фойдаланилади. Шу сабабдан бу тақсимотлар билан танишиш керак бўлади.



3.3-чизма Тезликлар бўйича тақсимотга доир.

Маълумки идеал газ молекулалари масофада ўзаро таъсирлашмайдиган, тартибсиз ҳаракатдаги эркин зарралар бўлиб, улар тўқнашганлардагина эластик ўзаро таъсир юз беради. Газ мувозанатда деб ҳисоблаймиз.

Тезликлар фазосида молекулани тезлиги Ox ўқ бўйича ташкил этувчисининг v_x, v_x+dv_x оралиқда бўлиш эҳтимоллиги

$$dW(v_x)=f(v_x^2)dv_x \quad (3.23)$$

бўлади, бунда $f(v_x^2)$ тақсимот функцияси v_x нинг катталигига боғлиқ бўлади, холос, шунинг учун у v_x^2 га боғлиқ бўлиши керак. Худди шунингдек молекула тезлиги Oy ва Oz ўқ бўйича ташкил этувчиларининг $v_y, v_y+dv_y, v_z, v_z+dv_z$ оралиқларда бўлишлиги эҳтимолликлари:

$$dW(v_y)=f(v_y^2)dv_y \text{ ва } W(v_z)=f(v_z^2)dv_z. \quad (3.24)$$

Барча йўналишлар тенг ҳуқуқли бўлганидан $F(v_x^2), f(v_y^2), f(v_z^2)$ функциялар бир хил кўринишда бўлишлиги керак.

Молекуланинг тезлиги ташкил этувчилари бир вақтда $v_x, v_x+dv_x, v_y, v_y+dv_y, v_z, v_z+dv_z$ оралиқларда бўлиш эҳтимолиги:

$$dW(v_x, v_y, v_z) = f(v_x^2) f(v_y^2) f(v_z^2) dv_x dv_y dv_z. \quad (3.25)$$

Иккинчи томондан, молекула $\sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ тезлигининг $dv_x dv_y dv_z$ тезликлар фазоси ҳажмида бўлиши эҳтимолиги:

$$dW(v_x, v_y, v_z) = f(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) dv_x dv_y dv_z. \quad (3.26)$$

(3.25) ва (3.26) ифодани солдалаштирсак,

$$f(v_x^2) f(v_y^2) f(v_z^2) = f(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f(v^2) \quad (3.27)$$

Бу тенгламани

$$f(v_x^2) = A^{\frac{1}{3}} e^{-\alpha v_x^2}, f(v_y^2) = A^{\frac{1}{3}} e^{-\alpha v_y^2}, f(v_z^2) = A^{\frac{1}{3}} e^{-\alpha v_z^2}$$

ва

$$f(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = A e^{-\alpha(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} = f(v^2)$$

$$dW(v^2) = A e^{-\alpha v^2} dv_x dv_y dv_z$$

функциялар қаноатлантиради. Нормалаш интегрални яқинлашувчи бўлишлиги $\alpha = -\beta < 0$ талабни қўяди.

Нормалаш шартидан: $A = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}$

Молекуланинг ихтиёрий 1 йўналишдаги тезлиги ташкилловчиси учун

$$f(v_i^2) = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\beta v_i^2} \quad (3.28)$$

Тезликнинг мутлоқ қиймати бўйича тақсимотни топиш учун сферик координаталарга ўтамиз, бунда

$$dv_x dv_y dv_z = v^2 dv \sin\theta d\theta d\phi$$

ва

$$dW(v, \varphi, \theta) A e^{-\beta v^2} v^2 dv \sin\theta d\theta d\varphi.$$

Молекулалар ҳаракати изотроп бўлганлиги учун бурчаклар бўйича интеграллаш бажарсак,

$$dW(v) = 4\pi A e^{-\beta v^2} v^2 dv \quad (3.29)$$

Демак, бу ҳол учун тақсимот функцияси

$$f(v) = 4\pi A v^2 e^{-\beta v^2} \quad (3.30)$$

ёки $A = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}$ эканлиги эътиборга олинса,

$$f(v) = 4 \left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} v^2 e^{-\beta v^2}. \quad (3.30')$$

Шу тақсимотни Максвелл тақсимоти дейилади. Бундаги β параметр мутлоқ T температура билан боғланган. Буни кўрсатиш учун молекулаларнинг идиш деворининг 1 см^2 га 1 с да урилишида берадиган импульси — босими ҳисобланади:

$$p = \frac{m n_0}{2\beta}, \quad (3.31)$$

бунда, m — молекула массаси, $p n_0$ — 1 см^3 даги молекулалар сони, p — босим. (3.31) ифодани идеал газ ҳолат тенгламаси $PV = RT$ билан таққосласак, оқибатда \bar{V}

$$\beta = \frac{m}{2kT} \quad (3.32)$$

муносабат келиб чиқади.

Энди

$$f(v_i^2) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m v_i^2}{2kT} \right), \quad (3.28)$$

$\vec{P} = m\vec{v}$ ($m v_x, m v_y, m v_z$) импульс орқали, $E = mv^2/2$ кинетик энергия орқали Максвелл тақсимоти қуйидагича ёзиб олинади:

$$f(p) = 4\pi (2\pi mkT)^{-\frac{3}{2}} p^2 \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT} \right), \quad (3.33)$$

$$f(E) = \sqrt{\frac{4}{\pi(kT)^3}} \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{kT} \right). \quad (3.34)$$

Максвелл тақсимоти асосида характеристик тезликларни топиб олинади.

1. Энг эҳтимолли тезлик $\frac{df(v)}{dv} = 0$ шартидан топилади, у

Максвелл тақсимоти максимумига тўғри келади. (3.30") дан:

$$v_{эз} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (3.35)$$

2. Ўртача тезлик қуйидаги ифодани аниқлайди:

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v f(v) dv = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (3.36)$$

3. Ўртача квадратик тезлик:

$$\overline{v^2} = \int_0^{\infty} v^2 f(v) dv = \frac{3kT}{m}. \quad (3.37)$$

4. Молекуланинг илгариланма ҳаракати ўртача кинетик энергиясини ҳам аниқлаш мумкин. У ўртача квадратик тезлик орқали ифодаланиши маълум:

$$\overline{E_k} = \frac{m \overline{v^2}}{2} = \frac{3}{2} kT. \quad (3.38)$$

Демак, \bar{E}_k молекула табиатига боғлиқ эмас, фақат газнинг мутлоқ Т температурасига пропорционал.

5. Максвелл тақсимооти асосида ўртача нисбий тезликларни ҳам аниқлаш мумкин:

$$\bar{v}_{\text{нис}} = \sqrt{2}\bar{v} \quad (3.39)$$

3.5. Классик статистик физиканинг асосий тасавурлари

Олдин айтиб ўтилганидек, кўп сонли зарралар ҳаракатлари ҳақидаги масалани механика еча олмайди, уни статистик усуллар билан ечилади. Статистик физикада бир неча муҳим тушунчалар киритилган.

Физик системанинг мувозанатий ҳолатларида турли макроскопик параметрлар ўзгармайди. Масалан, термодинамик, кимёвий ёки механик мувозанатлар мавжуд. Мисол учун, мазкур ҳажмдаги газнинг термодинамик мувозанатида системанинг температура ва босими ўзгармайди. Газнинг ҳар қандай мувозанатий макроскопик ҳолатига молекулаларнинг жуда кўп турли вазиятлари ва ҳаракатлари тўғри келади, чунки молекулалар узлуксиз ҳаракат қилиб туради, тўқнашишади, бинобарин, улар ўз жойларини ва тезликларини ўзгартириб туради, аммо системанинг макроҳолати ўзгармайди. Демак, битта макроскопик ҳолатга жуда кўп микроҳолатлар мос келади, ҳар қандай макроскопик катталиклар микроскопик катталикларнинг функциялари бўлади.

Системанинг бир макроҳолатига тўғри келган микроҳолатлар тўплами статистик ансамбл деб аталган.

Мазкур система макроҳолатига мос келган микроҳолатлар сонини термодинамик эҳтимоллик дейилади.

Статистик физикада фазалар фазоси деган тушунча бор.

Мисол учун, молекулани нуқтавий зарра деб қарасак, унинг 3 та координатаси ва 3 та импульс ташкил этувчилари бор. Агар координаталар ва импульслар фазоси фаразий тушунчасини киритилса, бир молекуланинг ҳолати 6 та ўлчов (6 та фазалар фазоси координаталари) орқали аниқланади. Агар система N та молекуладан (атомдан) иборат бўлса, уларнинг ҳолатларини 6Nта катталиқ аниқлайди, бунда фаразий 6N-

ўлчовли (x_1, x_2, \dots, x_n) координатали) фазалар фазоси тушунчаси киритилади ва бу фазода системанинг бир микроҳолати нуқта билан тасвирланади, уни фаза ҳам дейилади. Фазалар фазосида кичик dx_1, dx_2, \dots, dx_n ҳажмга ажратамиз. Бу ҳолда системанинг шу қисмчада бўлишлиги эҳтимоллиги

$$W(x_1, x_2, \dots, x_{6N}) = w(x_1, x_2, \dots, x_{6N}) \underbrace{dx_1, dx_2, \dots, dx_{6N}}_{6N \text{ мм}} \quad (3.40)$$

бўлади. Уни қисқароқ қилиб

$$dW(x) = w(x)(dx)^{6N} \quad (3.40')$$

кўринишда ифодаланади, $w(x)$ -эҳтимоллик зичлиги ёки тақсимот функциясиدير.

Системанинг фазалар фазосининг чекли Γ ҳажмда бўлиш эҳтимоллиги

$$dW(\Gamma) = \int_{\Gamma} dW(x) = \int_{\Gamma} w(x)(dx)^{6N}. \quad (3.41)$$

Бу ҳолда нормалаш шарти:

$$\int_{\Gamma \rightarrow \infty} w(x)(dx)^{6N} = 1. \quad (3.42)$$

Фазалар фазосининг бирлик ҳажмидаги нуқталар (микроҳолатлар) сони ρ бўлсин. Статистиканинг муҳим теоремаларидан бири Лиувилл теоремаси тасдиқлайди:

$$\text{Фазалар траекторияси бўйлаб ҳаракатланганда} \quad \frac{d\rho}{dt} = 0$$

бўлади, яъни фазалар фазосидаги кичик ҳажмча вақт ўтиши билан куча бориб ўз катталигини сақлайди:

$$(dx)_0^{6N} = (dx)_t^{6N}. \quad (3.43)$$

Лиувилл теоремасидан қуйидаги натижа бевосита келиб чиқади: тақсимот функцияси умумлашган q_i координаталар ва p_i импульсларнинг вақт ўтиши билан ўзгармайдиган бирлашмалари орқали ифодаланиши керак. Фақат ҳаракатнинг механик интеграллари шундай хоссага эгадир. Тақсимот функцияси шу

интегралга боғлиқ бўлиши ва бинобарин, узи ҳам ҳаракат интегралли бўлиши керак. Демак, мувозанат шароитида тақсимот функциясини ва система ҳолатини энергия аниқлаши керак.

Макроскопик катталиклар фазалар фазоси бўйича ўртачалаштирилган микроскопик катталиқка тенг бўлади. Масалан, ҳар қандай микроскопик физик F катталиқ $F(x)$ функциянинг ўртачаси сифатида аниқланади:

$$F = \overline{F^x} = \int_{\Gamma} F(x) w(x) dx = \overline{F^t} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} F(x, t) dt . \quad (3.44)$$

Вақт бўйича ва ансамбл бўйича ўртача қийматларнинг айнанлиги эргодик фараз дейилади.

3.6. Гиббснинг каноник тақсимоти

Термостатда жойланган изотермик система учун $w(x)$ тақсимот функциясини топайлик. Қараладиган ситемани янада катта системанинг қандайдир қисми деб ҳисобланади. Бу қисмни иккита x' ва x'' системачаларга ажратамиз. Бу системачаларда тақсимот функциялари уларнинг тўла $H(x, a)$ энергияларига боғлиқ деб ҳисоблаймиз, яъни

$$w(x') = w(H'(x', a')), \quad (3.45)$$

$$w(x'') = w(H''(x'', a'')). \quad (3.46)$$

Бунда x — системанинг $6N$ та (ички) параметри, a — ташқи параметрлари.

Изотермик системанинг тўла энергияси

$$H(x, a) = H'(x', a') + H''(x'', a'') + V_{12} \quad (3.47)$$

Бундаги V_{12} — системачалар орасидаги ўзаро таъсир энергияси. Уни H' ва H'' га нисбатан кичик қилиш учун тизимчалар етарлича катта қилиб олинади. Шундай қилиб,

$$H = H' + H'' . \quad (3.48)$$

Мустақил ички тизимчадан иборат тизим учун тақсимоат функцияси

$$w(H'+H'')=w(H')w(H''). \quad (3.49)$$

(3.49) ни логарифмлаб, сўнг дифференциаллаймиз:

$$\ln w(H'+H'')=\ln w(H')+\ln w(H''),$$

$$d \ln w(H'+H'')=d \ln w(H')+d \ln w(H'')$$

$$\text{ёки } [\ln w(H'+H'')]'(dH'+dH'')=[\ln w(H')]dH'+[\ln w(H'')]dH''.$$

dH' ва dH'' дифференциаллар мустақил юлга айланиши мумкин деб ҳисоблаб,

$$[\ln w(H'+H'')]}'=[\ln w(H)]}'=[\ln w(H'')]}'=\alpha$$

муносабатни оламиз, бунда α — қандайдир ўзгармас катталиқ, чунки турли аргументли функциялар ҳосиласи фақат улар ўзгармас бўлгандагина бир-бирига тенг бўла олади.

Охириги тенгликни интегралласак,

$$\ln w(H)=\alpha H+\beta \quad (3.50)$$

ифода ҳосил бўлади, бундан:

$$w(x)=e^{\alpha H+\beta}. \quad (3.51)$$

Бу ифодада $\alpha < 0$ бўлиши нормалаш шартидан келиб чиқиши равшан, шунинг учун қуйидагича белгилаш қиламиз:

$$\alpha = -\frac{1}{\theta}, \quad \beta = \frac{\psi}{\theta} \quad (3.52)$$

Энди (3.51) ифода

$$w(x)=e^{\frac{\psi-H}{\theta}} \quad (3.53)$$

қуринишга келади. Бу ифодани Гиббснинг каноник тақсимо­ти дейилади. θ ни каноник тақсимот модули дейилади. ψ доимийни нормалаш шартидан аниқланади:

$$\int_{\Gamma} w(x) dx = 1. \quad (3.54)$$

Гиббс каноник тақсимотини келтириб чиқаришда қаралаётган системада ўзаро таъсир кичик ва температура доимий деб ҳисобланади.

Зарралар бир-бирдан фарқланмайдиган ҳолда (масалан, электронлар гази қаралганда) фарқланадиган ҳолдагига нисбатан ўрин алмаштиришлар сони $N!$ марта кам, шунинг учун бу ҳолда

$$w(x) = \frac{1}{N!} e^{\frac{\psi - H}{\theta}}, \quad (3.55)$$

аммо $1/N!$ кўп ҳолда нормаланадиган доимийга таъсир қилмайди ва уни тушириб қолдириш мумкин.

Энди Гиббс каноник тақсимотининг асосий хоссалари ва натижалари устида тўхталамиз.

1. (3.54) нормалаш шартидан ташқи a параметр бўйича дифференциал олсак, сўнг уни 0 га тенгласак,

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial a_k} \right)_{\theta} = \left(\frac{\partial H}{\partial a_k} \right)_0 \quad (3.56)$$

муносабат келиб чиқади. $\left(\frac{\partial H}{\partial a_k} \right)_0$ ҳосила ўртача (термодинамик)

умумлашган A куч ифодасини беради, яъни

$$\left(\frac{\partial H}{\partial a_k} \right)_{\theta} = -\bar{A}_k = \left(\frac{\partial \psi}{\partial a_k} \right)_0 \quad (3.57)$$

2. Яна нормалаш шартини θ бўйича дифференциаллаб, сўнг нолга тенгласак,

$$\theta \left(\frac{\partial \psi}{\partial a_k} \right)_a = \psi - \bar{H} \quad (3.58)$$

муносабат келиб чиқади. Аммо, системанинг ўртача энергияси H ички термодинамик U энергияга тенг бўлганлиги учун

$$U = \psi - \theta \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right)_a \quad (3.59)$$

3. Олдин кўрганимиздек, қандайдир $F(x, a)$ функциянинг ўртача қиймати

$$\bar{F} = \int_{\Gamma} F(x, a) e^{-\frac{\psi - H}{\theta}} (dx)^{6N}. \quad (3.60)$$

ифодадан аниқланади.

4. (3.60) ифода бўйича:

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta} = \frac{1}{\theta^2} (\bar{F} - \bar{H})(H - \bar{H}). \quad (3.61)$$

5. Шунингдек,

$$\left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial a} \right)_\theta = \left(\frac{\partial F}{\partial a} \right)_\theta - \frac{1}{\theta} (F - \bar{F}) \left(\frac{\partial H}{\partial a} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial a} \right). \quad (3.62)$$

Каноник тақсимотнинг параметрлари θ ва ψ нинг физик маъносини аниқлайлик.

1. Гиббс тақсимот қонуни, термодинамиканинг биринчи қонуни ва (3.59) ифодадан фойдаланиб,

$\frac{\delta Q}{\theta} = d \left(-\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right)_a$ бўлишлигини аниқланади, θ интегралловчи

кўпайтувчи эканлиги маълум бўлади. Демак, мутлоқ температура T температуранинг ўхшаши (статистик температура) бўлади. Ҳисобнинг натижасига кўра,

$$\theta = kT \quad (3.63)$$

бўлишлиги топилади.

2. $\theta = kT$ ва $a = V$ деб олинса, (3.59) дан

$$U = \psi - T \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{V'} \quad (3.64)$$

ифода келиб чиқади. Буни биринчи қонунга қўйилса,

$$-\left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{V'} = S, \quad -T \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{V'} = ST$$

эркин энергиянинг

$$\psi = F = U - TS \quad \text{ёки} \quad F = \bar{H} - TS \quad (3.65)$$

ифодаси келиб чиқади. Демак, $\psi = F$ термодинамик эркин энергиянинг ўзи экан.

3. Энди (3.53) ни (3.54) нормалаш шартига қўйиб, ψ ни яқкаласак,

$$\psi = -\theta \ln \int_{\Gamma} e^{-\frac{H}{\theta}} (dx)^{6N} = -\theta \ln Z \quad (3.66)$$

ифодани оламиз. Бундаги

$$Z = \int_{\Gamma} e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad (3.67)$$

интегрални ҳолатлар интегралли дейилади. Агар энергия қийматлари дискрет бўлса, у ҳолда (3.67) ўрнига

$$Z = \sum_{i=1}^n e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad (3.67')$$

статистик йиғиндидан фойдаланилади, бунда E_i дискрет энергия спектрида i — ҳолат энергияси. Бу ҳолда ҳам (3.66) муносабат ўз кучини сақлайди.

Максвелл-Болцман тақсимоти

Гиббс каноник тақсимотидан кинетик энергиядан бошқа потенциал энергияга эга бўлган газ зарралари учун Максвелл-Болцман тақсимотини келтириб чиқариш мумкин. Бир зарранинг энергияси бу ҳолда

$$E = E_{кин} + E_{пот} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \quad (3.68)$$

Зарранинг (молекуланинг) импулси $p_x, p_x \leftrightarrow +dp_x$; $p_y, p_y \leftrightarrow +dp_y$; $p_z, p_z \leftrightarrow +dp_z$ оралиқда, координаталари $x, x \leftrightarrow +dx$; $y, y \leftrightarrow +dy$; $z, z \leftrightarrow +dz$ оралиқда бўлган ҳолати эҳтимоллиги

$$dw(p_x, p_y, p_z, x, y, z) = \text{const} \cdot \exp\left(\frac{\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)}{kT}\right) dp_x dp_y dp_z dx dy dz \quad (3.69)$$

бўлади. Бу Максвелл-Болцман тақсимотидир.

3.7. Гиббснинг катта каноник тақсимоти

Термодинамикада зарралар сони ўзгарувчан бўлган системалар учун μ кимёвий потенциал киритилади, у эркин энергиядан зарралар сони бўйича олинган ҳосила сифатида ифодланади:

$$\mu = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial N}\right)_{V, T} \quad (3.70)$$

Бундан:

$$\Psi = \mu N + \Omega(\mu, V, T) \quad (3.71)$$

ифода олинади (Ω - термодинамик потенциал).

Бу ҳолда тақсимот қонуни

$$w(N) = \frac{1}{N!} \exp\left(\frac{\Omega + \mu N - H}{\theta}\right) \quad (3.72)$$

кўринишда бўлади, уни Гиббснинг катта каноник тақсимоти дейилади. Ω термодинамик потенциал нормалаш шартидан аниқланади.

Ўртача қийматлар олдин кўрилган қоида асосида ифодланади:

$$\bar{N} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{\Gamma} N \exp \frac{\Omega + \mu N - H}{kT} (dx)^{6N},$$

$$\bar{H} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{\Gamma} H \exp \frac{\Omega + \mu N - H}{kT} (dx)^{6N}.$$

Бу тақсимот учун ҳолатлар интегралли вазифасини

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\exp \left(\frac{\mu N}{kT} \right)}{N!} \int_{\Gamma} e^{-\frac{H}{kT}} (dx)^{6N}$$

ифода бажаради, Ω эса

$$\Omega = -kT \ln Z \quad (3.73)$$

муносабат орқали аниқланади. Яна олинган

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, \mu} = -\bar{N}, \quad \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{N, T} = -\bar{N} \quad (3.74)$$

ифодалар Ω нинг маъносини ошкор қилади.

3.8. Квант статистика асослари

Микрозарралар дунёсида классик физика қонунлари иш-ламай қолади. Улар макрожисмлардан фарқли хоссаларга эга: элементар зарралар (электронлар, протонлар, нейтронлар ва ҳоказо) ҳам зарра, ҳам тўлқин табиатга эга бўлади, бир вақтда уларнинг жойи ва импульсини аниқ ўлчаб бўлмайди, бинобарин, микрозарралар ҳолатини бир вақтда координаталар ва импульслар ёрдамида тасвирлаб бўлмайди. Микрозарралар спин моментлари, магнитик моментларга эга, уларнинг энергияси қийматлари узук-узук спектр ташкил қилади, физик системалар ҳолатини квант механикада Шредингер тенгламаси тасвирлайди. Микрозарраларнинг барчаси бир биридан фарқланмайди. Хуллас, квант системаларда ўзига хос қонуниятлар асосида махсус хоссалар мавжуд.

Квант системаларининг статистик қонушмаларини квант статистикаси ўрганади.

Бу ҳолда фазалар фазоси бўйича барча интеграллар ўрнини квант системасининг барча ҳуусий ҳолатлари бўйича йиғиндилар олади:

Статистик йиғинди

$$Z = \sum_{i=1}^n \exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right) \quad (3.75)$$

бўлади, аммо $\Omega = -kT \ln Z$ ифода сақланади.

Энергиялар бўйича тақсимот функцияси

$$W_i(E_i) = \text{const} \exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right), \quad (3.76)$$

нормалаш шarti

$$\sum_{i=1}^{\infty} W_i(E_i) = \text{const} \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right) = 1, \quad (3.77)$$

энергиянинг ўртача қиймати

$$\bar{E} = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} E_i \exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right)}{\sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right)} \quad (3.78)$$

кўринишда бўлади.

(3.73) ифодани бошқачароқ қилиб ёзиб олайлик. i -ҳолат энергиясини ϵ_i , ундаги зарралар сонини n_i деб олсак, бу ҳолатдаги зарралар умумий энергияси $n_i \epsilon_i$, энди $N = \sum n_i$ бўлади.

Демак, бу ҳолатга мос термодинамик потенциал

$$\Omega_i = -kT \ln \sum_{n_i} \left(e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{kT}} \right)^{n_i} \quad (3.79)$$

кўринишда бўлади.

i — ҳолатдаги зарралар ўртача сони

$$-\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{\sum_{n_i} n_i \left(e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \right)^{n_i}}{\sum_{n_i} \left(e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \right)^{n_i}} = \bar{n}_i. \quad (3.80)$$

Паули принципига бўйсунадиган (яримбутун спинли) зарралардан (электронлар учун $S=1/2$) ташкилланган системада бир ҳолатда фақат битта зарра бўлиши ё бўлмаслиги мумкин, яъни $n_i = 0, 1$ қийматлар олади, холос. Бу ҳолда:

$$\sum_{n_i} \left(e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \right)^{n_i} = 1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}}, \quad \sum_{n_i} \left(e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \right)^{n_i} n_i = e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}}$$

Демак, i — ҳолатдаги ўртача зарралар сони (туғрироғи шу ҳолатда зарранинг бўлиш эҳтимолиги)

$$\bar{n}_i = f(\varepsilon_i, T) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} + 1}. \quad (3.81)$$

Бу ифода Ферми-Дирак статистикасига бўйсунадиган (Паули принципига бўйсунадиган) идеал газ учун Ферми тақсимот функциясидир. $\exp(\varepsilon - \mu)/kT \gg 1$ бўлганда у Болцман тақсимотига ўтади, яъни

$$f(\varepsilon_i, T) = \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}\right) \quad (3.82)$$

бўлиб олади.

Спини бўлмаган ёки спини бутун сон билан белгиланадиган зарралар ҳар қандай ҳолатда ихтиёрий сонда бўлиши мумкин (улар Паули тақиқ принципига бўйсунмайди).

Бу ҳолда

$$\Omega_i = -kT \sum_{n_i=0}^{\infty} \left(e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{kT}} \right)^{n_i} = -kT \left(1 + e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{kT}} + e^{2 \frac{\mu - \epsilon_i}{kT}} + \dots \right)$$

ифодадаги йиғинди $\exp \frac{\mu - \epsilon_i}{kT}$ махражли ва у 1 дан кичик бўлган чексиз геометрик прогрессия бўлади, шунинг учун

$$\Omega_i = kT \ln \left(1 - e^{\frac{\mu - \epsilon_i}{kT}} \right). \quad (3.83)$$

Демак, бу ҳолда

$$\bar{n}_i = f(\epsilon_i, T) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} - 1}. \quad (3.84)$$

Бу ифода Бозе-Эйнштейн статистикасига бўйсунадиган зарралар идеал гази учун тақсимот функциясиدير.

Ферми-Дирак квант статистикасининг электронлар айниган газига тадқиқ қилайлик.

Электронлар гази умуман айтганда Ферми-Дирак статистикасига бўйсунеди. Хусусий ҳолда электронлар зичлиги кам бўлган, яъни $\exp(\epsilon - \mu)/kT \gg 1$ ҳолда, бошқача айтганда, электронлар гази айнимаган ҳолда Максвелл тақсимотидан фойдаланиш мумкин. Агар мазкур тенгсизлик бажарилмаса, у ҳолда электрон газини айниган газ дейилади. Металларда эркин электронлар зичлиги катта, бинобарин, у газ айниган бўлади.

Мутлоқ ҳолда электрон газ тўла айниган бўлади, Электронлар энг паст энергияли ҳолатдан то қандайдир катта қийматли энергия ҳолатигача барча ҳолатларни тўла банд қилади. Шу энг юқориги ҳолат мутлоқ нолдаги Ферми энергияси (Ферми сатҳи) дейилади.

p ва $p+dp$ мутлоқ қийматли импульслар оралигида зарранинг илгариланма ҳаракат квант ҳолатлари сони

$$\frac{4 \pi p^2 dp dV}{(2 \pi \hbar)^3}$$

электронлар ҳолатлари статистик вази 2. Унга ушбу ифодани қўпайтурсак, квант ҳолатлар сони (V ҳажмда)

$$\frac{V p^2 dp}{2 \pi^2 \hbar^3} \quad \text{бўлади.}$$

Электронлар $p=0$ дан $p=p_0$ гача ҳолатларни эгаллаган, уларнинг сони:

$$N = \frac{V p_0^3}{6 \pi^2 \hbar^3}.$$

бундан юқориги импульс

$$p_0 = (3 \pi^2)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \hbar \quad (3.85)$$

ва юқориги энергия (Ферми сатҳи) $E_F = \frac{p^2}{2m} = E_F(T=0)$:

$$E_F(T=0) = (3 \pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.86)$$

Электронлар газининг тўла энергияси:

$$E = \frac{3}{10} (3 \pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} N. \quad (3.87)$$

Бу келтирилган ифодаларнинг қўлланиш шarti

$$T \ll \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.88)$$

$kT_F = E_F$ шartидан аниқланадиган T_F температурани айнаш температураси дейилади.

Ферми-Дирак статистикаси бўлганили айниган электронлар газининг иссиқлик снгими ($C_V = R N \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3}$) аниқлашнинг мумкин.

Айниган Бозе-газининг хоссалари ҳам ўрганилган. Қандайдир чегаравий T_0 температурадан пастга газнинг энергияси

$$E = 0,770 N T^{3/2} / T_0^{3/2} - T^{3/2}, \quad (3.89)$$

Демак, унинг иссиқлик снгими

$$C_V = \frac{5E}{2T} = T^{3/2}. \quad (3.90)$$

Бозе-газ босими:

$$p = 0,851 g \frac{m^{3/2} T^{5/2}}{h^3} \quad (3.91)$$

3.9. Қора нурланиш

Қора нурланишни фотонлар гази деб қараш мумкин. Фотонлар бир-бири билан ўзаро таъсирлашмайди, бинобарин, бу газни идеал газ деб ҳисобласа бўлади. Фотонлар спинга эга эмас ва Бозе-Эйнштейн статистикасига буйсунади. Фотонлар гази учун кимёвий потенциал $\mu=0$ бўлади.

$\epsilon_k = \hbar\omega_k$ энергияли ҳолатда бўлган фотонлар сони Планк ифодаси

$$f(\omega_k) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{kT}} - 1} \quad (3.92)$$

орқали тасвирланади. Ҳисобнинг натижасида спектрнинг такрорийликлар $d\omega$ оралигига тўғри келган қора нурланиш энергияси:

$$dE_\omega = \frac{Vh}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (3.93)$$

Агар такрорийликлар кичик ($\hbar\omega < kT$) бўлса, Релей-Жинс ифодаси келиб чиқади:

$$dE_{\omega} = V \frac{T}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega. \quad (3.94)$$

Бу ифода тебранма ҳаракат эркинлик даражалари сонини kT га кўпайтиришдан келиб чиққан. Бу ифодани катта такрорийликлар соҳасига асосиз тадбиқ этилса, у ҳолда нурланиш тўла энергияси

$E = \int_0^{\infty} dE_{\omega} = \infty$ бўлиб чиқади. Бу бемаъниликни "ультра-бинафша ҳалокат" деб номланган.

Аслида $\hbar\omega \gg kT$ ҳолда

$$dE_{\omega} = V \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} d\omega \quad (3.95)$$

бўлади (Вин ифодаси) ва тўла энергия ∞ га айланмайди, аксинча чекли қийматга эга бўлади.

Спектрал энергия зичлиги

$\frac{dE_{\omega}}{d\omega}$ қандайдир $\omega = \omega_m$ қийматда максимумга эришади:

$$\omega_m = 2.822 T_m / \hbar. \text{ Агар бунда } \omega_m = \frac{2\pi c}{\lambda_{\min}}$$

сак, $\lambda_{\min} T_m = \text{const}$ ифода ҳосил бўлади. Бу Виннинг силжиш қонуни бўлиб, у нурланувчи жисм температураси ошганда спектрал зичлик максимуми қисқа тўлқинлар (кичик λ лар) томонга силжийди деб тасдиқлайди. Бозе-Эйнштейн статистикаси Стефан-Болцманнинг ушбу – нурланишнинг тўла энергияси

$$E = AT^4 \quad (3.96)$$

нурланувчи жисм температурасининг тўртинчи даражасига пропорционал бўлади деган қонунини ҳам келтириб чиқаради.

Статистик физиканинг тадқиқот соҳалари жуда кенг. Биз бу бобда унинг асосий тасаввурлари, тушунчалари ва қонунари билан қисқа танишиб чиқдик, кейинги бобларда бу маълумот бироз тўлдирилиб қўлланишини ҳам назарда тутдик.

Саволлар ва масалалар

1. Тақсимот функциясини таърифлаш.
2. Нормалаш шартининг маъносини тушунириш.
3. Тасодикий катталикнинг ўртача қиймати нимани билдиради?
4. Қандай тақсимотларни биласиз?
5. Максвелл тақсимоти қандай ҳолда алоқали?
6. Молекуланинг массаси 10^{-22} г ва температура 300 К бўлганда энг эҳтимолли тезлик, ўртача тезлик ва ўртача квадратик тезликларни аниқланг.
7. Гиббснинг каноник тақсимогида қандай параметрлар иштирок этади?
8. Гиббс каноник тақсимогидан Бозе-Эйнштейн тақсимотини келтириб чиқаринг.
9. Гиббс каноник тақсимогидан Ферми-Дирак тақсимотини келтириб чиқаринг.
10. Мўтлоқ қора жием нурланиши қонунларини қайси статистика тушуштириб бера олади. Шу асосда Стефан-Болцман ва Вин силжиш қонунлари қандай кўринишда бўлади?
11. Ферми-Дирак тақсимотини электронларнинг айниган газига тадбиқлаб Ферми сатҳи энергиясини топишга ҳаракат қилинг.

IV БОБ

ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРДА ИССИҚЛИК ҲОДИСАЛАРИ

Олдинги II бобда анча батафсил қараб чиқилган кристалл панжараси атомлари (ионлари) тебранишлари назариясининг энг муҳим тадбиқларидан бири кристалл панжараси иссиқлик сизими назариясидир.

4.1. Иссиқлик сизимининг классик назарияси

Классик физикада панжара атомлари ҳаракати мумтоз механика қонунларига бўйсунди деб ҳисобланади. Бу қонунлардан бири ўртача энергиянинг барча эркинлик даражалари бўйича тенг тақсимот қонуни бўлиб, унга кўра бир эркинлик даражасига тўғри келадиган ўртача кинетик энергия $(1/2)kT$ га тенгдир (бундаги k -Больцман доимийси). Шу асосда қаттиқ жисмнинг иссиқлик сизими мумтоз қонуни келиб чиқади. Маълумки, ҳар қандай тебранишни уч ташкил этувчига ажратиш мумкин, ҳар ташкил этувчига (тебранма ҳаракат эркинлик даражасига) тебранувчи атомнинг $(1/2) kT$ ўртача кинетик энергияси ва $(1/2) kT$ ўртача погенциал энергияси тўғри келади, демак, ҳар бир тебранма эркинлик даражасига

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_{кин} + \bar{\epsilon}_{ном} = (1/2)kT + (1/2)kT = kT \quad (4.1)$$

энергия тўғри келади, тебранаётган атомнинг ўртача тўла энергияси

$$\bar{\epsilon}_a = 3kT \quad (4.2)$$

бўлади. Агар грамм-атом миқдордаги кристалл олинса, унинг атомлари тебранишлари тўла энергияси

$$E_{NA} = N_A \bar{\epsilon}_a = 3N_A kT = 3RT, \quad (4.3)$$

бу ерда N -Авогадро сонни, R -газ универсал доимийси.

Таърифга кўра, қаттиқ жисмнинг иссиқлик сизими деб температура бир градус қадар ўзгарганда унинг ички энергиясининг ўзгариши миқдорига айтилади. Бу сизимни $C = dE/dT$ тарзда аниқланади. C - сизим айрим термодинамик катталиклар функцияси бўлиб, унинг кўриниши ва қиймати қандай шароитда аниқланишига боғлиқдир.

Агар иссиқликнинг сизими жисм ҳажми ўзгармас сақлангани ҳолда аниқланса, $C_V = \left(\frac{dE}{dT} \right)_{V=const}$, босим

ўзгармас сақланса, $C_p = (dE/dT)_p = const$ кўринишида белгиланади. Одатда температура ўзгарганида кристалл қаттиқ жисмларнинг ҳажми кам ўзгарганлиги туфайли уларнинг иссиқлик сизимини C_V деса бўлади, (хона температурасида C_p -сизим C_V - сизим дан 3-5% чамасида ортиқ холос).

Демак, граммоллекуляр (моляр) иссиқлик сизим

$$C_M = C_V = \frac{dE_{N_A}}{dT} = 3R \approx 6 \text{ кал/мол.град} \quad (4.4)$$

бўлади: бир атомли кристалл қаттиқ жисмнинг моляр иссиқлик сизими 6 кал/мол.град бўлиши керак. Бу қонунни Дьюлонг-Пти қонуни дейилади. Хона температурасида бир қатор моддалар иссиқлик сизимини ўлчашлар Дьюлонг-Пти қонуни яхши бажарилишини кўрсатади, айрим моддалар учун C нинг қиймати Дьюлонг-Пти қонунига мос келмайди.

4.1 - жадвал

Модда	C_M , кал/мол.град	Модда	C_M , кал/мол.град
Алюминий	6,14	Кумуш	6,13
Темир	6,39	Рух	6,10
Олтин	6,36	Йод	6,6
Мис	5,90	Кремний	4,64
Қалъий	6,67	Бор	2,51
Платина	6,29	Карбон(олмос)	1,35

Бу масалага кейинроқ тўхталамиз.

Юқоридаги мулоҳазаларни давом эттирсак, икки атомли кристаллар учун C_M бир атомли кристалларникидан 2 баробар, яъни $C_M = 12$ кал/мол. град, чунки буларнинг бир граммолли

энергияси 2 баробар кўп, уч атоми кристаллар учун $C_{\mu}=18$ кал/мол.град бўлиши керак. Бир қатор кристаллар устида ўлчашлар хона температурасида мос қийматларни беради.

4.2 -жадвал

Модда	C_{μ} ,кал/мол.град	Модда	C_{μ} ,кал/мол.град
CuO	11,3	CaCl ₂	18,2
NaCl	12,1	BaCl ₂	18,6

То паст температуралар олиш усуллари ишлаб чиқилгунча ва бу температураларда иссиқлик сигимини ўлчашлар йўлга қўйилгунча хона температураси ва ундан юқорида бажарилган ўлчашлардан Дьюлонг-Пти қонуни ҳамма вақт ўринли бўладиган қонундай туюларди.

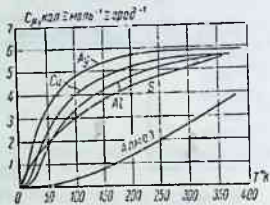
Аммо, паст температуралар соҳасида Дьюлонг-Пти қонунидан четланишлар жуда сезиларли бўлишлиги, аниқроғи, температура пасайган сари қаттиқ жисмларнинг иссиқлик сигими камайиб бориши кузатилади. 4.3-жадвалда мис ва олмос иссиқлик сигимининг тажрибавий қийматлари келтирилган.

4.3 -жадвал

Мис		олмос	
Температура °C	C_{μ} ,кал/мол.град	Температура °C	C_{μ} ,кал/мол.град
-259	0,04	-183	0,03
-186	3,32	-66	0,64
-39	5,59	+85	2,12
+50	5,90	+985	5,51

Бундай қонуният барча бошқа қаттиқ жисмлар учун ҳам кузатилган.

Биз бу бандда кристалл панжараси атомлари тебранишлари билан боглиқ бўлган иссиқлик сигимини кўраётимиз. Юқорида бу иссиқлик сигимининг Дьюлонг-Пти қонунига олиб келадиган мумтоз назариясини қараб чиқдик.



4.1-чизма. Баъзи қаттиқ жисмлар иссиқлик сигимининг температурага богланиши

4.2. Кристалл панжараси иссиқлик сизимининг квант назарияси

Дебай температураси θ_D дан паст температураларда квант қонуниятлари асосий аҳамиятга эга. Ҳар бир қаттиқ жисм учун старлича юқори температураларда бажариладиган Дьюлонг-Пти қонуни (иссиқлик сизими температурага боғлиқмас деб тасдиқловчи қонун) паст температураларда бажарилмаслиги тажрибалардан маълум бўлгандан кейин иссиқлик сизимининг квант назариясини яратиш зарурлиги аён бўлди. Планкнинг мутлоқ қора жисм нурланиши квант назарияси асосида А.Эйнштейн (1907) биринчи бўлиб, ўзининг иссиқлик сизими назариясини таклиф қилди. Унингча, N атомдан ташкилланган кристалл бир хил ω такрорийликли $3N$ та тебранишга эга бўла олади. ω такрорийликли тебраниш эҳтимоллигини Планк ифодаси тавсифлайди:

$$f(\hbar\omega) = \frac{1}{\frac{\hbar\omega}{e^{kT}} - 1} \quad (4.5)$$

Ҳар бир тебраниш энергияси кванти $\hbar\omega$ га тенг, ўртача энергияси

$$f(\hbar\omega) \cdot \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{\frac{\hbar\omega}{e^{kT}} - 1}, \quad (4.5')$$

бутун кристалл тебранишлари жами энергияси

$$E = \frac{3N\hbar\omega}{\frac{\hbar\omega}{e^{kT}} - 1}. \quad (4.6)$$

Ўзгармас ҳажм шаронтида кристаллнинг иссиқлик сизими

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = 3NkF(\omega, T), \quad (4.7)$$

бунда

$$F(\omega, T) = \frac{(\hbar\omega / kT)^2 \exp(\hbar\omega / kT)}{[\exp(\hbar\omega / kT) - 1]^2}. \quad (4.8)$$

Юқори T ларда ($\hbar\omega \ll kT$ бўлганда) $F(\omega, T)=1$, бинобарин, $C_V=3Nk$, бир граммол учун эса $C_V=3Nk=3R$ бўлиб, яъни бу ҳолда Дьюлонг -Пти қонуни адолатлидир.

Паст T ларда ($\hbar\omega \gg kT$ бўлганда)

$$F(\omega_E, T) = \left(\frac{\hbar\omega_E}{kT} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega_E}{kT} \right) = \left(\frac{T_E}{T} \right)^2 \exp\left(-\frac{T_E}{T} \right), \quad (4.9)$$

бундаги $T_E = \frac{\hbar\omega_E}{k}$ -Эйнштейннинг тавсифий температураси.

Эйнштейн назарияси C_V -бўйича тажриба натижаларини сифатан тушунтиришга, яъни C_V нинг T пасайиши билан камайиб боришини кўрсатишга эришди. (4.9) ифодада температура пасайган сари $\exp(-T_E/T)$ жуда тез камаяди. $(T_E/T)^2$ секин ортади, натижада $F(\omega, T)$ бу ҳолда тез камайиб боради. Аммо, Эйнштейннинг ҳамма атомлар бир хил ω такрорийлик билан тебранади деган фарази фақат ҳамма атомлар мустақил тебрангандагина тўғри бўларди, ваҳоланки, ҳақиқатда кристалл атомлари бир-бири билан боғланган равишда тебранади. Эйнштейн чиқарган (4.9) ифода кўрсаткичли функция тарзида ўзгаради. Тажриба T пасайиши билан C_V нинг даражали қонун бўйича камайишини тасдиқлайди.

П. Дебай (1912) таклиф қилган иссиқлик сифими назарияси кўпчилик кристаллар учун паст температураларда ўтказилган тажрибалар натижаларини яхши тушунтира олди.

Дебай ҳам кристалл N атомдан ташкилланган бўлса, унда $3N$ та тебраниш бўлиши керак, аммо ҳар бир тебраниш ўзининг тўлқин вектор \vec{k} га боғлиқ ω такрорийлигига эга, барча ω частоталар сони $3N$ дан иборат эркинлик даражалари сонига тенг, бунда такрорийликлар 0 дан то максимал ω такрорийликгача бўлган $3N$ та қийматни олади, яъни (3.82) ифода ўринли бўлади. Акустик тебранишлар тармоғи учун аниқланган такрорийлик тақсимотининг (3.58) ифодасини (3.82) га қўйиб ҳисобласак,

$$\int_0^m g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 v_0^3} \int_0^m \omega^2 d\omega = \frac{V \omega^3}{2\pi^2 v_0^3} = 3N$$

бундан:

$$\omega_m = v_0 \left(\frac{6\pi^2}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.10)$$

$V_0 = V/N$ - элементлар катак ҳажми.

3.5 бандда (3.83) ифода кўринишида Дебай температурасини максимал ω_m такрорийлик орқали ифодалаган эдик. Энди уни (3.10) ифодадан фойдаланиб тавсифлаймиз

$$\theta_{ak} = \frac{\hbar \omega_m}{k} = \left(\frac{6\pi^2}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar}{k} v_0 \quad (4.11)$$

Оптик тармоқлар учун ҳам Дебай температуруларини кiritиш мумкин.

$$\theta_j = \hbar \omega_j / k \quad (4.12)$$

Ўша 3.5 - бандда баён қилинган фононлар (энергия $\hbar \omega_q$, квази импульси $\hbar \bar{q}$) тушунчасидан фойдаланамиз. (3.78)-(3.80) ифодаларни қўллаймиз. Унда кўрганимиздек ҳар бир ω тебранишнинг (ω такрорийликли фононларнинг) энергияси

$$\epsilon_q = \hbar \omega_0 + \frac{\hbar \omega}{e^{kT} - 1} \quad (4.13)$$

бўлиб, у (4.5) Эйнштейн ифодасидан биринчи ҳад билан фарқланади, уни тебранишнинг нолинчи энергияси дейилади. (4.13) ифодани барча тармоқлар ва такрорийликлар бўйича жамласак, бутун кристалл панжараси тебранишлар тўла энергияси ҳосил бўлади:

$$E = E_0 + \sum_{i=1}^3 \sum_q \frac{\hbar \omega_{qi}}{e^{kT} - 1} + \sum_{j=4}^{3s} \sum_q \frac{\hbar \omega_{qj}}{e^{kT} - 1} \quad (4.14)$$

Биринчи ҳад тўла нолинчи энергия, $\sum_{i=1}^3$ йигинди учта

акустик тармоқ бўйича, $\sum_{j=4}^{3s}$ эса, $3s-3$ та оптик тармоқ

бўйича олинади.

(4.14) ифодадаги йиғиндиларни қуйидаги мулоҳазалар асосида соддароқ йўл билан ҳисоблаш мумкин. Акустик тармоқлар бўйича йиғиндини интеграл билан алмаштира бўлади.

$$E_{ak} = \sum_{i=1}^3 \sum_q \frac{\hbar \omega_{qi}}{\frac{\hbar \omega_{qi}}{kT} - 1} \approx \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar \omega}{\frac{\hbar \omega}{kT} - 1} g(\omega) d\omega = \frac{3V \hbar}{2\pi^2 v_0^3} \int_0^{\omega_m} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \quad (4.15)$$

Агар ўлчамсиз $x = \hbar \omega / kT$ катталиқ киритсак,

$$E_{ak} = NkT \cdot 3D(\theta_{ak}/T) \quad (4.15')$$

бўлади, бунда

$$D(\theta_{ak}/T) = \left(\frac{T}{\theta_{ak}} \right)^3 \int_0^{\theta_{ak}/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (4.16)$$

Оптик тармоқларда $\omega(q)$ такрорийликлар q нинг функцияси сифатида кам ўзгаради. Шунинг учун ҳар бир оптик тармоққа бир $\omega(q_j)$ такрорийлик мос келади деб ҳисоблаймиз.

$$E_{on} = \sum_{j=4}^{3s} \sum_q \frac{\hbar \omega_{qj}}{e^{\frac{\hbar \omega_{qj}}{kT}} - 1} = N \sum_{j=4}^{3s} \frac{\hbar \omega_{qj}}{e^{\frac{\hbar \omega_{qj}}{kT}} - 1} \quad (4.17)$$

Агар бу ҳолда ўлчамсиз $\frac{\hbar \omega_{qj}}{kT} = \frac{\theta_j}{T}$ катталиқлар киритсак,

$$E_{on} = NkT \sum_{j=4}^{3s} \frac{\frac{\theta_j}{T}}{e^{\frac{\theta_j}{T}} - 1} \quad (4.17')$$

Энди кристаллнинг тебранишлари тўла энергияси қуйидаги кўринишда бўлади:

$$E = E_0 + E_{ak} + E_{on} = E_0 + NkT \left\{ 3D\left(\frac{\theta_{ak}}{T}\right) + \sum_{j=4}^{3s} \frac{\frac{\theta_j}{T}}{e^{\frac{\theta_j}{T}} - 1} \right\} \quad (4.14')$$

Чегаравий ҳолларда кристалл панжарасининг иссиқлик сизими қандай бўлишлигини кўрайлик.

а) Юқори температуралар ($T \gg \theta_{ak}, \theta_j$) соҳасида $x \ll 1$ бўлганлиги туфайли (4.16) интегралда

$$e^x - 1 = 1 + x - 1 = x, \text{ шунинг учун } D\left(\frac{\theta_{akp}}{T}\right) \approx 1, \text{ оптик тармоқ}$$

бўйича йиғинди

$$\sum_{j=4}^{3s} \frac{\theta_j / T}{e^{\theta_j / T} - 1} \approx \sum_{j=4}^{3s} \frac{\theta_j / T}{\theta_j / T} = 3s - 3$$

Шундай қилиб,

$$E = E_0 + 3NkT + (3s - 3)NkT = E_0 + 3sNkT$$

$$\text{Бундан } C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = 3sNk \text{ ва } C_\mu = 3R \text{ бўлишлиги,}$$

яъни юқори температуралар соҳасида Дьюлонг-Пти қонуни тўғри эканлиги келиб чиқади. Бу ҳолда барча акустик ва оптик тармоқлардаги тебранишлар уйғотилган бўлади.

б) Энди паст температуралар ($T \ll \theta_{ak}, T \ll \theta_j$) соҳасини кўрайлик. Бу ҳолда оптик тармоқларга тегишли ҳадлар $(\theta_j / T)^{-\theta_j / T}$ тартибида бўлиб, 1 га нисбатан анча кичикдир, бу йиғиндиларни (4.14') да ташлаб юбориш мумкин, чунки бу ҳолда юқори такрорийликли оптик тебранишларни уйғотишда kT чамасидаги иссиқлик ҳаракати энергияси етарли эмас. Бинобарин, паст температуралар соҳасида оптик тебранишлар деярли уйғотилмаган бўлганлиги туфайли бу тармоқлар иссиқлик сизимига сезиларли хисса қўша олмайди. (4.16) интегралда юқори чегарани ∞ деб олинса,

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

бўлади.

Демак, (4.14') ифода қуйидаги кўринишни олади:

$$E = E_0 + \frac{3\pi^4 NkT^4}{5\theta_{ak}^3} = E_0 + \frac{\pi^2 V (kT)^4}{10h^3 v_0^3} \quad (4.14'')$$

Бу ифода асосида аниқланадиган иссиқлик сѳгими:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{12\pi^4 k}{5} N \left(\frac{T}{\theta_{ak}} \right)^3 \quad (4.18)$$

Агар $N=N_A$ (Авогадро сони), у ҳолда $N_A k=R$ бўлади ва (4.18) моль иссиқлик сѳгимини ифода-лайди. (4.18) ифода паст температура-лар панжарасининг иссиқлик сѳгими T^3 га мутаносиб равишда ўзгаради деб тасдиқлайди. Бу қонун тажрибада 20- 25 K тартибдаги температура-ларда яхши бажарилади. Дебай-нинг назарияси эластик туташ муҳит тақриби (континуал тақриб) қўлланадиган паст температурада уйғонган узун тўлқинлар ҳолида адолатли эканлиги тасдиқланади.

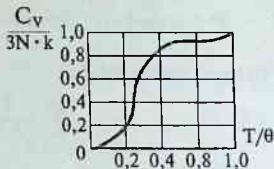
4.1- чизмадан кўринишича, иссиқлик сѳгимининг унинг Дьюлонг-Пти ифодасига нисбати паст температураларда $(T/\theta)^3$ га мутаносиб, юқори температураларга 1 га интилади.

Яна шунга эътибор бериш керакки, классик(мумтоз) соҳа квант соҳадан $T=\theta$ да эмас, балки пастроқ температурада аж-ралади. Албатта, Дебай назарияси бекаму-кўст назария эмас, $\sim T^3$ қонуннинг бажарилиш соҳаси батафсил таҳлил қилинган тадқиқотлар ҳам маълум.

4.3. Кристалл қаттиқ жисмнинг панжаравий иссиқлик ўтказувчанлиги

Қаттиқ жисмларда, газлар ва суюқликлардан фарқли равиш-да, иссиқлик фақат иссиқлик ўтказувчанлик орқали узатилади.

Умуман айтганда, кристаллда иссиқлик энергияси фонон-лар, фотонлар, эркин электронлар (ёки эркин коваклар), элек-трон-ковак жуфтлари, экситонлар орқали узатилиши мумкин. Биз бу бандда фонон иссиқлик ўтказувчанликни қараб чиқамиз. Уни баъзан панжаравий иссиқлик ўтказувчанлик ҳам дейилади.



4.2-чизма. Қаттиқ жисмлар иссиқлик сѳгимининг Дебай температурасидан пастда ўзгариши.

Агар қаттиқ жисм намунаси учлари турли температураларда тутиб турилса, у ҳолда намунадан иссиқликнинг узлуксиз оқими вужудга келади: иссиқроқ учдаги кристалл панжара тугунлари катгароқ амплитуда билан тебранади, улар ўзлари боғланган қўшниларига таъсир қилиб, уларнинг тебраниш амплитудасини (бинобарин, энергиясини) орттиради, бу қўшнилари ўз навбатида намунанинг совуқроқ учи томонга бу таъсирни (иссиқлик энергиясини) узатади.

Масалан, dT/dx температура градиенти мавжуд бўлган (стерженнинг) намунанинг ds кўндаланг кесими орқали dt вақтда ўтган dQ иссиқлик оқимини молекуляр физика фанидан маълум

$$dQ = -\lambda \frac{dT}{dx} dSdt \quad (4.19)$$

ифода бўйича ҳисоблаш мумкин, бундаги λ - иссиқлик ўтказувчанлик коэффициенти.

Биз олдинги бобда кристалл панжараси атомлари тебранишларини фононлар деб аталадиган квази зарралар орқали ифодалаш мумкинлигини кўрган эдик. Ана шунга кўра кристалларда иссиқлик энергиясини фононлар орқали узатилади деб айтиш мумкин.

Дебай назарияси бўйича, панжаранинг уйғонган ҳолатини кристалл ҳажмида эркин ҳаракатланувчи фононлар идеал газни кўринишида тасаввур қилинади. Фононлар газининг температура-ларнинг муайян оралиғида идеал газ хоссаларига эга, шунинг учун қаттиқ жисмнинг панжараси (фононлар) иссиқлик ўтказувчанлиги коэффициентини идеал газникидай кўринишида ифодаласа бўлади:

$$\lambda_{\phi} = \frac{1}{3} C \bar{l}_{\phi} v_m, \quad (4.20)$$

бунда C — фононлар газининг бирлик ҳажмининг иссиқлик сифими,

\bar{l}_{ϕ} — фононнинг эркин югуриш йўли ўртача узунлиги,
 v_m - мазкур жисмда товуш тезлиги.

Фононларнинг эркин югуриш ўртача \bar{l}_{ϕ} узунлигини ҳисоблаш анча қийин, аммо назариянинг сифатий таҳлили

старлича юқори температураларда \bar{l}_ϕ — нинг мутлоқ температурага тескари пропорционал эканлигини кўрсатади.

Шунинг учун λ_ϕ иссиқлик ўтказувчанлик коэффициентини ҳам $T > \theta$ бўлганда мутлақ температурага тескари пропорционал, яъни, $\lambda_\phi \sim 1/T$, чунки бу соҳада C ва v_m катталиклар температурага боғлиқ эмас.

Етарлича тоза кристалларда мутлақ нолга яқин температураларда \bar{l}_ϕ — намунанинг ўлчамларига боғлиқ.

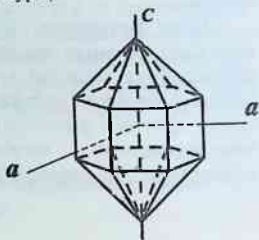
Бунинг сабаби шуки, паст температураларда фононлар зичлиги [(3.78) ифодага қаранг] жуда кам, бинобарин, фононлараро тўқнашишлар эҳтимоли кичик, бу ҳолда фононлар намунанинг у чегарасидан бу чегарасига деярли тўқнашишсиз ҳаракат қилади, демак, агар намуна ўлчами d бўлса, $\bar{l}_\phi \sim d$ бўлади.

Бу ҳолда,

$$\lambda_\phi = \frac{1}{3} C v_m d . \quad (4.21)$$

Энди (4.21) ифоданинг ўнг томонида фақат C - гина температурага боғлиқ. Дебай қонунига кўра, $C \sim T^3$, бинобарин, $\lambda_\phi \sim T^3$ бўлиши керак. Бу хулосани тажриба тасдиқлайди.

Албатта, кристалларда боғланиш кучлари анизотроплиги иссиқлик ўтказувчанлик коэффициентини λ_ϕ нинг анизотроп бўлишлигига олиб келади. Кварцнинг тузилишини кўрсатадиган 4.3- чизма ва унинг йўналишга боғлиқ (анизотроп) иссиқлик ўтказувчанлигини намоён қиладиган жадвал келтирилган.



4.3-чизма. Кварцнинг тузилиш чизмаси

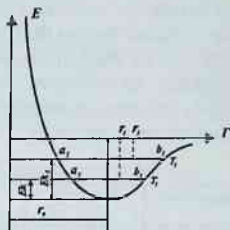
4.4 -жадвал

$\lambda_\phi \cdot 10^5$ кал. моль/град с	Температура, К			
	373	273	195	83
с ўққа параллел йўналишда	7.7	11.7	16.8	42.1
с ўққа тик йўналишда	4.8	6.2	8.7	21.1

Жадвалдан кварц кристаллининг с ўқи бўйлаб иссиқлик ўтказувчанлиги, у ўққа тик йўналишдагисидан деярли икки марта катталиги кўриниб турибди. Бундан ташқари, T температура камайган сайин λ_{ϕ} иссиқлик ўтказувчанлик ортиб бораётгани кўринади. Бу квант назариясини тасдиқлайдиган натижадир. [9,175-б] Биз кристалл панжараси тебранишлари (фононлар) билан боғлиқ иссиқлик ўтказувчанликка оид баъзи асосий қонуниятларни қараб чиқдик холос. Бошқа иссиқлик ўтказувчанлик механизмлари ҳақида ўз жойида яна тўхталамиз.

4.4. Қаттиқ жисмларнинг иссиқликдан кенгайиши ва узайиши

Қаттиқ жисмларнинг иссиқликдан кенгайишини тушунириш учун қаттиқ жисм зарраларнинг ўзаро таъсир энергиясининг улар орасидаги масофага боғлиқлиги чизмага (4.4-чизмага) мурожаат қиламиз. Агар зарралар мутлақ ҳаракатсиз бўлса, бу ҳолда уларнинг кинетик энергиялари нолга тенг бўлар, улар орасидаги масофа r_0 га тенг бўлиб, потенциал чуқурнинг тубида жойлашган бўлардилар. Бу ҳол мутлақ нол температурада бўлиши мумкин эди.



4.4-чизма. Қаттиқ жисмларнинг иссиқликдан кенгайишини тушунирадиган тасвир

Аммо, ҳақиқатда зарралар ўз мувозанати вазиятлари атрофларида тебраниб турадилар, яъни муайян кинетик энергияга эга бўладилар. Температура ортиши билан бу кинетик энергия ҳам ортиб боради. T температурада зарра E кинетик энергияга эга бўлиб, чапга a_1 нуқтага, ўнгга b_1 нуқтага четлашади. Потенциал эгри чизиқнинг носимметриқлиги туфайли тебранаётган зарранинг ўртача вазияти энди r_0 га тенг бўлмай, ундан ўнгга силжиб r_1 қийматга эришади.

Температурани T_2 гача оширилса, зарранинг кинетик энергияси E_{k2} юқори қийматни олади. Бунда зарра чапга a_2 нуқтагача, ўнгга b_2 нуқтагача четлашади, ўртача вазият эса r_2 қийматга эришади. Шундай қилиб, температура ортиб борга-

нида кристалл панжараси тугунлари оралиги ортади, яъни ис-
сиқликдан кенгайиш ($r_2 > r_1 > r_0$) юз беради.

Маълум $l_t = l_0(1 + \alpha t)$ ифода (бунда t — Целсий даражаси-
даги температура, α — ўртача узайиш коэффиценти, l_t, l_0 —
температуранинг t ва 0 қийматлардаги стержен узунликлари)
поликристалл, яъни хоссалари деярли йўналишларга боғлиқ
бўлмаган (изотроп) моддалар учун тўғри бўлади. Монокри-
сталлар эса анизотроплик хоссаларига эга, уларнинг чизиқий
узайиши α коэффиценти умуман айтганда тензор
кўринишидаги катталиқдир.

Агар монокристаллдан шар ясалса, кейин уни иситилса
ёки совутилса, у ҳолда шар ўз шаклини йўқотиб, энг умумий
ҳолда уч ўқли эллипсоидга айланади, унинг ўқлари кристалло-
график ўқлар билан боғлиқдир. Уч кристаллографик ўқ бўйлаб
иссиқликдан кенгайиш коэффициентларини кристаллнинг ис-
сиқликдан кенгайиши бош коэффициентлари дейилади ва
 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ орқали белгиланади. Жадвалда баъзи кристаллар учун
маълумот келтирилган.

4.5 - жадвал

Кристалл	Система	T, K	$\alpha_1 \cdot 10^6$ град ⁻¹	$\alpha_2 \cdot 10^6$ град ⁻¹	$\alpha_3 \cdot 10^6$ град ⁻¹
Гипс	Моноклин	313	1,6	42	29
		60		- 2	55
Рух	Гексагонал	150	300	8	65
		300		13	64
Калцит	Тригонал	313	313	-5,6	25

Жадвалдан кўринадикки, температура камайган сари $\alpha_1, \alpha_2,$
 α_3 лар ҳам камаяди, айрим температураларда баъзида манфий
қийматлар олиши ҳам мумкин, бош коэффициентлар айрим
кристалларда бир-биридан анча фарқ қилади.

Кристалларнинг иссиқликдан кенгайиши (узайиши) унинг
атомлари орасидаги ўзаро таъсир кучларнинг ангармоник
қисми билан боғлиқ бўлади. Буни қуйидаги ҳисоб тас-
диқлайди:

Фараз қилайлик, икки атом (кристалл панжарасидаги
қўшни атомлар) r_0 мувозанатли вазиятидан унча катта
бўлмаган $r - r_0 = x$ четланишлар ҳолида бир-бири билан

$$F = - \frac{dU}{dx} = - \beta x + \gamma x^2 \quad (4.22)$$

куч билан ўзаро таъсирлашсин. У ҳолда ўзаро таъсир потенциал энергияси

$$U = -\int_0^x F dx = \frac{1}{2} \beta x^2 - \frac{1}{3} \gamma x^3, \quad (4.23)$$

бунда β — эластиклик (гармониклик) коэффиценти, γx^3 ни ангармоник ҳад дейилиб, γ — ангармониклик коэффиценти.

Больцман тақсимоти бўйича атомнинг мувозанатли вазиятдан x масофага четланиш эҳтимоли

$$f(x) = A \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) = A e^{-\beta x^2 / kT} \left(1 + \frac{\gamma x^3}{3kT}\right), \quad (4.24)$$

бунда $\frac{\gamma x^3}{3kT} \ll 1$ деб ҳисоблаб, иккинчи кўпаювчи

$$\exp\left(\frac{\gamma x^3}{3kT}\right) = 1 + \frac{\gamma x^3}{3kT} \quad (4.25)$$

қаторга ёйилган.

А доимий нормалаш (меъёрлаш) шартидан топилади:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2 / 2kT} \left(1 + \frac{\gamma x^3}{3kT}\right) dx = 1, \quad (4.26)$$

қатнашган иккинчи интеграл нолга тенг бўлади, чунки унинг остидаги функция тоқ функциядир. Натижада

$$A = \left(\frac{\beta}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.27)$$

қийматни ҳосил қиламиз.

Атомнинг мувозанатий вазиятдан ўртача четланиши

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx = \frac{\gamma kT}{\beta^2}, \quad (4.28)$$

бунда, биринчи интеграл ўз остидаги функция тоқ бўлганлиги тўғрисида нолга тенг бўлади.

Иккинчи интеграл қиймати маълум Пуассон интегралига келтирилади.

Таърифга кўра, чизиқий иссиқликдан кенгайиш α коэффиценти бирлик узунлик ва 1^0 C га ҳисобланган узайишдир:

$$\alpha = \frac{\bar{x}}{aT} = \frac{\gamma k}{a\beta^2}, \quad (4.29)$$

бундаги $a=r_0$ — панжара доимийси. (4.29) дан иссиқликдан кенгайиш атомларининг ангармоник ҳаракатига боғлиқлиги яққол кўриниб турибди.

Мисол тариқасида бир валентли ионлар кристаллини қарайлик. Бу ҳолда ионлар ўзаро таъсир кучини

$$F = -\frac{e^2}{r^2} + \frac{B}{r^{10}} \quad (4.30)$$

деб ҳисобласа бўлади, бу ифодада — e^2/r^2 деформацияланмай-диган турли ишорали кўшни ионлар орасидаги Кулон қонуни бўйича тортишиш кучи, B/r^{10} — шу ионлар орасидаги итаришиш кучи, у масофа ўзгаришига қараб тез ўзгаради. Мувозанатда $F = 0 = -\frac{e^2}{a^2} + \frac{B}{a^{10}}$, a — ионларнинг мувозанатли оралиги. Бундан, $B=e^2 a^8$ эканлиги келиб чиқади.

Аммо, $r=(a+x)$ бўлганлиги ва x нинг a га нисбатан кичкиналигини ҳисобга олсак,

$$F = -\frac{e^2}{(a+x)^2} + \frac{e^2 a^8}{(a+x)^{10}} \approx -\frac{8e^2}{a^3} x + \frac{52e^2}{a^4} x^2, \quad (4.31)$$

(4.31) ва (4.22) ифодаларни таққосласак,

$$\beta = 8e^2 / a^3, \quad \gamma = 52e^2 / a^4. \quad (4.32)$$

Бу натижаларни (4.29) ифодага қўйсак, ионлар кристалл панжараси учун

$$\alpha = 52 ak / 64 e^2 \quad (4.33)$$

муносабатни ҳосил қиламиз.

$a=3 \cdot 10^{-8}$ м, $\kappa=1,38 \cdot 10^{-23}$, $J \cdot K^{-1}$, $e=1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл қийматларни (4.33) ифодага қўйсак, $\alpha=1,5 \cdot 10^{-5}$ град⁻¹ натижа келиб чиқади, бу — тартиб жиҳатдан тўғридир.

Бу бобнинг якунида шуни айтиш керакки, қаттиқ жисмларнинг иссиқлик снгими билан иссиқликдан кенгайиши орасида боғланиш бор:

Иссиқликдан кенгайиш коэффициентини α нинг атомлар (моляр) C_v иссиқлик сифимига нисбати мазкур модда учун температурага боғлиқ бўлмаган доимийликдир (Грюнейзен қонуни):

$$\alpha / C_v = \gamma_G k / 3V . \quad (4.34)$$

Ҳақиқатдан, бу икки ҳодиса температура ортганида атомлараро масофа ортишига боғланган.

Масалалар ва саволлар

1. 2 ва 3 атомли қаттиқ жисмларнинг моляр иссиқлик сифимини классик (мумтоз) тақрибда аниқланг.

2. Эйнштейннинг қаттиқ жисмнинг иссиқлик сифими назариясининг асосий фарзлари қандай?

3. Дебай температураси қандай аниқланади? У ниманиифодалайди?

4. ω тақрорийликли барча фононлар энергиясини ёзинг.

5. ν (товуш тезлиги) $= 5 \cdot 10^3$ м/с, элементар ячейка ҳажми $V_0 = 2 \cdot 10^{-29}$ м³ бўлганда Дебай температураси нимага тенг?

6. Нима учун Дебай температурасидан пастда оптик тебранишлар иссиқлик сифимини аниқлашда эътиборга олинмайди?

7. Иссиқлик ўтказувчанликнинг қандай кўринишлари бор? Қаттиқ жисмларда унинг қайси кўриниши муҳим?

8. Агар фононларнинг эркин югуриш йўли хона температурасида NaCl кристалл панжараси a доимийсидан 4 марта катта бўлса, бу кристаллнинг иссиқлик ўтказувчанлигини ҳисобланг.

9. Агар кумушнинг иссиқлик ўтказувчанлик коэффициентини 418 Вт/м.град, унда товуш тезлиги 3700 м/с бўлса, $T = 300$ К да фононнинг эркин югуриш ўртача узунлиги қанча?

10. 30 Кда олмоснинг солиштирма иссиқлик сифими аниқлансин.

V БОБ

ИДЕАЛ КРИСТАЛЛДА ЭЛЕКТРОНЛАРНИНГ ЭНЕРГИЯЛАРИ СПЕКТРИ

5.1. Кристалл учун Шредингер тенгламаси. Адиабатик тақриб

Ҳар қандай қаттиқ жисм жуда кўп атомлардан ташкил топган бўлади. Атомларнинг ядролари идеал кристаллда мунтазам панжара ташкил қилади. II бобда кўрганимиздек, атомлар кристалл панжараси тугунларидаги ўзининг мувозанатли вазиятлари атрофида тебраниб туради. Нейтрал кристаллда ядроларнинг мусбат заряди барча электронларнинг манфий зарядига миқдоран тенг бўлади. Демак, кристалл қаттиқ жисм кўп заррали квант тизимдир. Унинг стационар ҳолатларини Шредингер тенгламасини ечиб топилади:

$$\hat{H} \Psi = W \Psi_1, \quad (5.1)$$

бундаги ҳамильтониан (тўла энергия оператори)

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{M_j} \nabla_{R_j}^2 + V(R, r) \quad (5.2)$$

кўринишда бўлиб, унинг биринчи ҳади электронлар кинетик энергиялари операторлари йигиндиси, иккинчи ҳади ядролар кинетик энергиялари операторлари йигиндиси $V(R, r)$ ўзаро таъсир потенциал энергиясидан иборат. Потенциал энергияни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$V(R, r) = \sum_{j,k} \frac{z_j z_k e^2}{R_{jk}} + \sum_{i,k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{i,j} \frac{z_j e^2}{r_{ij}}. \quad (5.3)$$

Ушбу ифодаларда m — электрон массаси, M_j эса j — ядронинг массаси, r_i ва R_j — мос равишда, i — электроннинг ва j —

ядронинг радус векторлари, R_{jk} — ядролар орасидаги, r_{ik} — электронлар орасидаги, r_{ij} — электронлар билан ядролар орасидаги масофалар, z_j, z_k — ядроларнинг атом номерлари. (5.3) ифодада R_{jk}, r_{ik}, r_{ij} масофалар ҳисобида индекслар тенг бўлмаслиги керак. (5.1) ифодада W — кристаллнинг тўла хусусий энергияси, Ψ эса унинг тўлқин функцияси бўлиб, у барча зарраларнинг координаталарига боғлиқдир:

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) \quad (5.4)$$

Аслида (5.1) Шредингер тенгламаси ечилса, кристалл қаттиқ жисм хоссаларига тегишли барча саволларга қатъий жавоблар олиниши мумкин бўларди. Аммо, қаттиқ жисмнинг 1 м^3 ҳажмида 10^{28} дан ортиқ атом (зарраларнинг умумий сони ундан ҳам кўп) бўлади. Бу эса тўлқин функция ўшанча сон чамасидаги ўзгарувчиларга боғлиқ бўлади, демакдир. Бундай тенгламани ва унинг ечимини ҳатто ёзиб чиқиш амалда мумкин эмас. Шундай ёзув усули топилганда ҳам олинган ечим тажрибада кузатилган қонуниятларни тушунтириш учун ярамайди (газ барча молекулаларининг координаталари ва тезликларини билганда ҳам газ ҳолатини аниқлаб бўлмаслигини эслайлик).

Синчиклаб бажарилган тадқиқотлар натижасида Шредингер тенгламасининг умумий аниқ ечимини топишга урунишнинг зарурати йўқлигини, етарлича асосланган тақрибий ҳисоблаш қаттиқ жисмнинг барча муҳим хоссаларини тушинтириши мумкинлигини кўрсатди. Шредингер тенгламасини ечишнинг самарадор тақрибий усулини адиабатик бир электронли яқинлашиш (тақриб) деб номланган. У қаттиқ жисмларда электронларнинг энергиялари спектри назариясига асос бўлган.

Адиабатик яқинлашиш (тақриб). Атомлар ядролари массаси электрон массасидан кўп марта катта бўлганлиги учун кристаллдаги атомлар ядролари панжара тугунларида қўзғалмас туради деб ҳисобланса, (5.2) ҳамилтон операторида ядролар кинетик энергиясининг $(-\hbar^2/2) \sum_{M_j} \frac{1}{M_j} \nabla_{R_j}^2$ операторини ташлаб юборилса, у

ҳолда қўзғалмас ядролар майдонида ҳаракатланаётган электронлар системасининг $\phi(r, R)$ тўлқин функцияси қуйидаги Шредингер тенгламасига бўйсунди:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{r_i}^2 + V(R, r) \right\} \varphi = E \varphi, \quad (5.5)$$

буида E — электронлар системасининг хусусий энергияси. Энди ядролар ҳаракатини ҳисобга олиш мақсадида бутун кристаллнинг тўлқин функцияси

$$\Psi(r, R) = \Phi(R) \cdot \varphi(r, R) \quad (5.6)$$

кўринишда ифодалаймиз. $\Phi(R)$ — ядролар тизими тўлқин функцияси. Агар (5.6) ифодани (5.1) тенгламага қўйилса ва (5.5) эътиборга олинса,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_j \nabla_{R_j}^2 / M_j + E(R) \right] \Phi = W \Phi \quad (5.7)$$

тенглама ҳосил бўлади. Бу тенглама ядролар тизимининг улар $E(R)$ потенциал энергияли электронлар системаси майдонида ҳаракатлангани ҳолида стационар (вақтга боғлиқ бўлмаган) ҳолатларни аниқлаб берадиган Шредингер тенгламасидир. Шундай қилиб, электронлар ва ядролардан ташкил топган тизим ҳолатлари ҳақидаги аниқ квант механик масаласи иккита соддароқ масалаларга.

1). Электронларнинг қўзғалмас ядролар $V(r, R)$ майдонида ҳаракати ҳақидаги (5.5) масаллага;

2). Ядроларнинг электронлар ҳосил қилган $E(R)$ ўртача майдонда ҳаракати ҳақидаги (5.7) масаллага ажралади.

!Оқорида баён қилинган тақрибий усулни **адиабатик яқинлашиш** дейилади.

5.2. Хартри-Фок усули. Бир электронли яқинлашиш

Адиабатик яқинлашиш (тақриб) кўп заррали квант система ҳолатлари ҳақидаги масалани бироз соддалаштириб, қўзғалмас ядролар майдонида электронлар ҳаракати масаласига келтиради. Бироқ, электронлар тизими учун ёзилган (5.5) тенгламани ҳам ечиш қийинлиги ва уни ечишга уринишнинг номақбуллиги тўғрисида гапирдик. Бу масалани ечишнинг тақрибий йўлларини қидирилди. Ана шундай усулларнинг энг самаралиларидан бири Хартри-Фок усули бўлиб, у кўп элек-

тронли масалани бир электронли масалага айлантиради. Хартри-Фок усули \hat{H} хамилтонианда электронларнинг ўзаро таъсир энергиясини ҳар бир электрон мустақил ҳаракатланадиган даврий бирор ташқи майдондаги $U_{eff}(\vec{r})$ эффектив потенциал энергияси билан алмаштириш ғоясига асосланган. $U_{eff}(\vec{r})$ майдон барча бошқа электронларнинг мазкур бир электронга ўртача таъсирини энг яхши равишда тавсифлайдиган қилиб танлаб олиниши керак. Тизимнинг хамилтониани энди фақат бир электроннинг координаталарга боғлиқ хамилтонианлар йигиндисидан иборат бўлиб қолади:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \text{ Бунда } \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\vec{r}_i) + U_{eff}(\vec{r}). \quad (5.8)$$

Бу ифодада $V(\vec{r}_i)$ қўшилувчи i — электроннинг ядролар майдонидаги, $U_{eff}(\vec{r})$ эса шу электрондан бошқа барча электронлар майдонидаги потенциал энергиялар.

Энди электронлар тизимининг тўлқин функцияси.

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2), \dots, \varphi_n(\vec{r}_n) \text{ бўлади.}$$

Ихтиёрий i — электрон учун ёзилган Шредингер тенгламаси:

$$\hat{H}_i \varphi_i(\vec{r}_i) = E_i \varphi_i(\vec{r}_i). \quad (5.9)$$

$U_{eff}(\vec{r})$ ни энг яхши равишда танлаб олиш қандай?

Бу ишни қандайдир ўз-ўзидан мослашган амаллар асосида бажариш мумкинлигини қуйида кўрамиз.

Олдин 2 та электрондан иборат тизимни қараб, натижаларни ихтиёрий N сондаги электронлар ҳолига умумлаштираемиз.

Икки электрон учун

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2). \quad (5.10)$$

Электроннинг ҳолати учта x, y, z (\vec{r}) координаталардан ташқари яна спиннинг проекцияси қиймати билан ҳам аниқланади. Паули қонунига асосан, икки электрондан иборат

тизимда агар электронлар ўрнини алмаштирсак, тўлқин функцияси ўз ишорасини ўзгартириши керак, яъни:

$$\Phi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\varphi_2(1) \} = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) \end{vmatrix}, \quad (5.11)$$

бунда 1 ва 2 ҳолатлар белгиланади. ҳақиқатан, $\Phi(2,1) = -\Phi(1,2)$.
 N та электронли тизим учун:

$$\Phi(1,2,3,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\varphi_1(2)\dots\varphi_1(N) \\ \varphi_2(1)\varphi_2(2)\dots\varphi_2(N) \\ \dots\dots\dots \\ \varphi_N(1)\varphi_N(2)\dots\varphi_N(N) \end{vmatrix} \quad (5.12)$$

(5.8) ва (5.12)лардан фойдаланиб, тизимнинг E энергиясини ҳисоблаб чиқилади:

$$E = \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau_1 d\tau_2 \dots d\tau_N \quad (5.13)$$

Мураккаб ҳисобларни келтирмасдан Хартри-Фок усулининг келгуси амалларини сўз билан айтиб ўтамиз.

(5.8) ифодага кирган H_1 ва e^2/r_{12} спинга боғлиқмас, шунинг учун спин бўйича йиғиш фазовий координаталаридан мустақил бажарилади. Бундан кейин $U_{eff}(\vec{r})$ қуйидаги кўринишни қабул қилади:

$$U_{eff}(\vec{r}) = \sum_j \int \frac{e^2 |\varphi_{nj}(\vec{r}_2)|^2}{r_{12}} d\vec{r}_2 - \sum \frac{\varphi_{mj}(\vec{r}_1)}{\varphi_m(\vec{r}_1)} \int \frac{e^2 \varphi_m(\vec{r}_2) \varphi_{mj}(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_2. \quad (5.14)$$

Бу асосда

$$\left[\hat{H}_1 + U_{eff}(\vec{r}) \right] \varphi_m(\vec{r}_1) = E_m \varphi_m(\vec{r}_1). \quad (5.15)$$

ёки

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_1}^2 + V_{r_1} + U_{eff}(\vec{r}_1) \right\} \varphi_m(\vec{r}_1) = E_m \varphi_m(\vec{r}_1) \quad (5.16)$$

Бу тенгламаларни Хартри-Фок тенгламалари дейилади.

$U_{eff}(\vec{r})$ ни ҳисоблаб чиқиш учун φ_n функцияларни танлаб олиш зарур. Нолинчи яқинлашишда қандайдир бир электронли φ_n функциялар олинади, сўнг U_{eff} ҳисоблаб чиқилади, кейин U_{eff} ифодасидан φ_n функцияларни биринчи тақрибда аниқланади, бу ишни кераклигича давом эттириш мумкин. Масалан, φ_n функциялар сифатида, урнига қараб, эркин электрон ёки атомда боғланган электрон тўлқин функциялари олинishi мумкин. Бу масалага биз кейинроқ тўхталамиз.

5.3. Даврий электрик майдонда ҳаракатланаётган электрон масаласи

Кристаллар симметрияси $U_{eff}(\vec{r})$ потенциал майдоннинг ҳам кристалл даврийлигига эга бўлишлигини тақозо қилади. Демак, электроннинг қўзғалмас атомлар ядролари ва бошқа электронлар майдонидаги потенциали, яъни

$$V(\vec{r}, R) + U_{eff}(\vec{r}) = V(\vec{r})$$

даврий бўлади ва кристаллдаги электрон шу даврий майдонда ҳаракатланади. Бундан кейин бу потенциални $V(\vec{r})$ белгиси билан қўллаш мумкин.

Энди электроннинг тўлқин функциясини танлаймиз. У Блох функциясидан иборат:

$$\varphi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (5.17)$$

бунда \vec{k} — электроннинг тўлқин функцияси, $u_k(\vec{r})$ амплитуда эса даврий:

$$u_k(\vec{r} + \vec{a}_n) = u_k(\vec{r}). \quad (5.18)$$

Ҳақиқатан, агар Блох тўлқин функцияларини (5.14) га қўйилса, $U_{eff}(\vec{r})$ нинг кристалл даврийлигига эга бўлишлиги келиб чиқади, яъни (5.17) ечим ўз-ўзига мослашгандир.

Тўлқин вектор \vec{k} ни қуйидаги кўринишда ёзилади (\vec{k} билан λ тўлқин узунлиги $\vec{k} = (2\pi/\lambda) \vec{n}$ муносабатда боғланган):

$$\bar{k} = \frac{g_1}{G} \bar{b}_1 + \frac{g_2}{G} \bar{b}_2 + \frac{g_3}{G} \bar{b}_3 \quad (5.19)$$

бунда G — катта тоқ сон, $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3$ — тескари панжара векторлари, g_1, g_2, g_3 — бутун сонлар. \bar{k} вектор G^3 квазидискрет қиймат олади.

Бу ифодани ҳосил қилиш учун кристаллнинг асосий соҳаси сифатида $G\bar{a}_1, G\bar{a}_2, G\bar{a}_3$ қирралари бўлган параллелепипед ажратиб олинади, бу ҳолда $G\bar{a}_i$ қадар силжиш тўлқин функция қийматини ўзгартирмайди (Борн-Карман даврийлик шарти). Агар (5.17) ифодада \bar{r} ўрнига $\bar{r} + \bar{a}_n$ қўйилса, $\varphi_{\bar{k}}$ ўз қийматини сақлайди. Ҳақиқатан,

$$\varphi_{\bar{k}}(\bar{r} + \bar{a}_n) = U_{\bar{k}}(\bar{r} + \bar{a}_n) e^{i\bar{k}\bar{r}} e^{i\bar{k}\bar{a}_n} = U_{\bar{k}}(\bar{r}) e^{i\bar{k}\bar{r}}$$

чунки $\exp i\bar{k}\bar{a}_n = 1$, $\bar{k}\bar{a}_n = 2\pi \bullet$ бутун сон. \bar{a}_n нинг энг кичик қийматлари \bar{a}_j бўлади ва $\bar{k}\bar{a}_i = 2\pi$ келиб чиқади. Демак, тўлқин вектор шундай давр билан ўзгаради. Унинг физик жиҳатдан турли қийматлари

$$-\pi \leq \bar{k}\bar{a}_i \leq +\pi \quad (i=1,2,3) \quad (5.20)$$

оралиқда ётади. Бу соҳани биринчи Бриллюэн зонаси дейилади. Кристаллнинг тескари ва тўғри панжаралари векторлари кўпайтмаси $\bar{a}_i \bar{b}_k$ агар $i=k$ бўлганда 2π га, $i \neq k$ да нолга тенглигини эътиборга олиб, (5.19) ни \bar{a}_i га кўпайтирсак, $\bar{k}\bar{a}_i$ нинг қийматлари $\bar{k}\bar{a}_i = 2\pi g_i / G$ бўлади, уларни (5.20) га қўйилса,

$$-\frac{G}{2} \leq g_i \leq +\frac{G}{2} \quad (5.21)$$

кўринишдаги оралиқ биринчи (келтирилган) Бриллюэн зонасини ифодалайди.

Блох функциясини электрон учун ёзилган

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_{\bar{k}} + V(\bar{r}) \varphi_{\bar{k}} = E_{\bar{k}} \varphi_{\bar{k}} \quad (5.9)$$

Шредингер тенгласига қўйилса,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_k + V(\vec{r})u_k - \frac{\hbar^2}{m}(\vec{k}\nabla u_k) = (E_k - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})u_k \quad (5.22)$$

тенглама ҳосил бўлади. $k=0$ учун (5.22) тенглама φ_k учун ёзилган (5.9) га ўхшаш бўлади.

Турли қўринишдаги даврий майдонларда электрон ҳаракатини тақиқлаш электроннинг энергиялари спектри рухсатланган ва тақиқланган қийматлар ораллиқларига (зоналарига) ажралишлигини кўрсатади. Қуйида бир неча ҳолларни кўриб чиқамиз.

5.4. Кучсиз ва кучли боғланган электронлар тақриблари

$E = E(\vec{k})$ боғланишни умумий ҳолда топиш муҳим масала бўлиб, аммо у шу кунгача ечилмаган. У ёки бу қаттиқ жисملарнинг турли физик хоссаларини ўрганишда бир неча тақрибий усуллар қўлланади.

1. Булардан бири кучсиз боғланиш тақрибининг нолинчи яқинлашиши сифатида эркин электрон ҳолати олинади, кристаллнинг даврий электрик майдони эса эркин электроннинг кинетик энергиясига нисбатан кичик бўлган потенциал энергия ҳосил қиладиган кичик таъсир (ғалаён) деб ҳисобланади. Шредингер тенгласиси асосида кетма-кет бажариладиган биринчи, иккинчи, ... тақрибий ҳисоблар оқибатида электронларнинг кристалл қаттиқ жисмдаги энергиялари спектри ифодасига келинади.

Даврий жадвалнинг 1-4 гуруҳларига мансуб металлларни назарий ва тажрибавий текширганда уларда ўтказувчанлик электронлари ҳаракатини тавсифлаш учун деярли доимий потенциалдан фойдаланиш мумкинлигини кўрсатди.

Кичик ғалаён деб қараладиган $V(\vec{r})$ кучсиз даврий потенциални Фурье қаторига ёямиз:

$$V(\vec{r}) = \sum_{g \neq 0} V_g \exp(i\vec{b}_g \vec{r}), \quad (5.23)$$

бунда \vec{b}_g тескари панжара вектори. Яна бунда $V_0=0$ деб ҳисобладик, ўнг томон ҳақиқий бўлиши учун $V_{-g} = V_g^*$ шарт ба-

жарилиши керак. Блок функцияси амплитудасини ҳам Фурье қаторига ёйилади:

$$u_k(\vec{r}) = \sum_h a_h \exp(i\vec{b}_h \vec{r}). \quad (5.24)$$

(5.23) ва (5.24) ифодаларни (5.22) тенгламага қўямиз:

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{\hbar^2}{2m} \vec{b}_k^2 a_k e^{i(\vec{b}_k \vec{r})} + \sum_h \sum_{g \neq 0} V_g a_h e^{i(\vec{b}_g + \vec{b}_h) \vec{r}} + \sum_h \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{b}_h \vec{k}) a_h e^{i(\vec{b}_h \vec{r})} = \\ = \sum_h (Ek - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) a_h e^{i(\vec{b}_h \vec{r})}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Икки қаррали йиғиндида h ва g бўйича йиғнашни $h-g$ ва g йиғнашга алмаштирамиз, бу ҳолда кўрсаткичли функцияда $\vec{b}_g + \vec{b}_h$ ни \vec{b}_h га алмаштирилса, мазкур йиғинди:

$$\sum_h \sum_g V_g a_{h-g} \exp(i\vec{b}_h \vec{r})$$

кўринишга келади. Барча \vec{r} лар учун (5.25) тенглик айнан ба- жарилиши учун ҳамма $\exp(i\vec{b}_h \vec{r})$ лар олдидаги коэффициентлар йиғиндиси нолга тенг бўлиши зарур.

Бу ҳолда (5.25) дан:

$$\left[Ek - \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{b}_h)^2 \right] a_h - \sum_{g \neq 0} V_g a_{h-g} = 0. \quad (5.26)$$

$$(h_1, h_2, h_3 = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots).$$

Эркин электрон учун $V_g = 0$ ва шунинг учун

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{b}_h)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad (5.27)$$

чунки, $E(\vec{k} + \vec{b}_h) = E(\vec{k})$.

Энди (5.26) ни кучсиз даврий майдон учун ечамиз. Бу ифодада $a_0 = 1$ деб, йиғиндида битта $g = h$ ли ҳадни қолдирамиз. У ҳолда

$$a_h = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_h}{b_h^2 + 2(\bar{b}_h \bar{k})}. \quad (h \neq 0) \quad (5.28)$$

$a_{h \neq 0}$ коэффициентлар электроннинг тўлқин функциясига биринчи тақрибдаги тузатмалар бўлади.

Эркин электроннинг $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ энергиясига қўшимча энергия

$$E'_k = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{g=0} \frac{|V_g|^2}{b_g^2 + 2(\bar{b}_g \bar{k})} \quad (5.29)$$

бўлишлигини топиш қийин эмас, бунда (5.26) да $h=0$ тегишли қўшилувчилар билан кифояланиш мумкин. Махражнинг

$$b_g^2 + 2(\bar{b}_g \bar{k}) \approx 0$$

бўлишлиги интерференцион шартни ифодалайди. Шу шартни қаноатлантирувчи \bar{k} лар учун

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm |V_g| \quad (5.30)$$

бўлади, яъни электрон энергияси $2|V_g|$ га тенг узилишга эга бўлади. Бир ўлчовли ҳол қаралганда рухсатланган зоналар орасидаги тақиқланган зоналар бор. Аммо, икки ўлчовли ва уч ўлчовли ҳолларда бундай бўлмаслиги ва икки зона бир-бирининг устига тушиши мумкин. Бу ҳодиса металлларда муҳим ўрин тутати.

Энди кучли боғланган электронлар тақрибни кўрайлик. Электроннинг кинетик энергияси унинг $V(r)$ потенциал энергиясидан анча катта бўлгандан кейингина электрон эркин ҳаракатининг ғалаёни деб қараш мумкин. Бу ҳол кристаллни катта энергияли электронлар билан нурлантирилганда рўёбга чиқиши мумкин. Аммо кристаллдаги атомдаги электроннинг кинетик энергияси унинг потенциал энергияси тебранишлари тартибида бўлади, шунинг учун кристалл электронларига кучсиз боғланиш (квази эркин электрон) тақрибни қўллаш мумкин эмас. Агар электроннинг энергиялари спектрини ҳисоблашда нолинчи яқинлашиш сифатида электроннинг якка

атомдаги ҳолати олинса ва кристаллнинг даврий электрон энергияси эса қаралса, у ҳолда квази боғлиқ электрон назарияси яратилади. Ҳақиқатан, айрим атомлар бири-бирига яқинлашиб кристал панжарасини ҳосил қила бошлаганида улардаги электронларнинг дискрет (ажрим) энергиялари сатҳлари парчаланиб, энергия зоналарига айлана боради. Содда кубик панжара учун Шредингер тенгламаси мазкур усулда ечилса, электроннинг хусусий энергиялари

$$E(k) = E_a + C + 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (5.31)$$

ифодага келади. Бунда E_a — якка атомдаги электрон энергияси, C — ўзаро таъсир доимийси, A — қўшни тугунлардаги атомлар электронларининг алмашинув ўзаро таъсирини ҳисобга олувчи кўпайтувчи. Бу ифодадан қуйидаги хулосалар келиб чиқади.

1) Кристал панжараси ҳосил бўлганида атомларнинг ўзаро таъсири оқибатида якка атомдаги электроннинг E_a сатҳи C катталиқ қадар силжийди. Силжиш йўналиши C нинг ишорасига боғлиқ.

2) Якка атомдаги электроннинг энергетик сатҳи ўрнига кристалл панжарада электрон энергиялари зонаси мавжуд бўлади. Электроннинг E энергияси \vec{k} тўлқин вектори k_x, k_y, k_z ташкил этувчиларига даврий боғлиқ бўлади.

3) $\cos k_i a = \pm 1$ бўлганда (5.31) ифоданинг катта ва кичик қийматлари қуйидагича бўлади:

$$E_{\max} = E_a + C + 6A, \quad (5.32)$$

$$E_{\min} = E_a + C - 6A. \quad (5.33)$$

Демак, содда кубик панжара учун электрон энергиялари зонаси кенглиги

$$E_{\max} - E_{\min} = 12A. \quad (5.34)$$

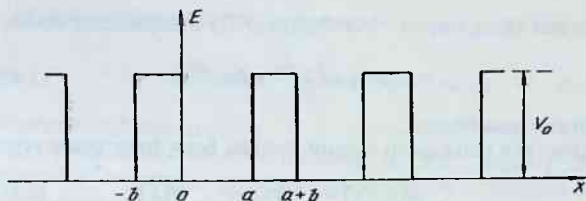
Кучли боғланган электрон тақриби, равшанки, атомларнинг чуқур энергетик сатҳларида жойлашган электронлар учун ўзини оқлайди, чунки, бу электронлар панжаранинг бошқа тугунларда атомлар билан ўзаро суэт таъсирлашади.

Албатта, кучсиз боғланган электронлар ҳамда кучли боғланган электронлар тақриблари кристаллнинг ўтказувчанлик

зонасидаги электронлар ҳолатини миқдоран тўғри тавсифлай олмайди, улар айрим кристаллардаги электронларнинг энергетик спектрини ва тўлқин функцияларини ҳисоб-китоб қилишга ярамайди. Бироқ, муҳими шуки, бу тақриблар электронинг даврий майдонда ҳаракати тўғрисида яққол умумий хулосалар чиқариш имконини беради.

5.5. Крониг-Пенни модели

Электрон даврий электрик майдонда ҳаракат қилганда унинг электрик спектри қандай бўлишлигини яққол кўрсатадиган содда моделлардан бири Крониг-Пенни моделидир. У атомларнинг бир чизиқ бўйлаб даврий жойлашган ҳолига мос бўлиб, бунда масалани соддалаштириш мақсадида мазкур йўналишда электрон учун навбатлашувчи (даврий) тўғри бурчакли потенциал тўғри чизиқлар мавжуд деб фараз қилинади. Тўсиқнинг кенлиги a , атомнинг электрон учун ҳосил қилган потенциал чуқурлиқнинг кенлиги b ва тўсиқнинг баландлиги V_0 бўлсин (5.1- чизма). Бу ҳолда кристал панжарасининг доимийси $c=a+b$ бўлади.



5.1-чизма. Крониг-Пенни модели.

Электроннинг бундай даврий майдондаги E энергияси тўсиқнинг баландлигидан кичик деб ҳисобланади. Шунинг таъкидлашмишки, квант механикасига асосан, электрон бу потенциал тўсиқлар устидан ўтишга энергияси етарли бўлмасда, тўсиқлар деворидан туннел ўтиш (тирқиш) йўли билан ўтиб кета олиши мумкин ва шу йўсинда бу бир ўлчовли кристал бўйлаб ҳаракатлана олади.

Бу ҳолда электрон учун Шредингер тенгламаси қуйидаги кўринишда бўлади:

$$+\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V)\psi = 0, \quad (5.35)$$

бундаги $\Psi_{(x)}$ электроннинг тўлқин функцияси.

(5.35) тенглама потенциал чуқур ва потенциал тўсиқ соҳалари учун, мос равишда, қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0, \quad (5.36)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k^2\psi_2 = 0, \quad (5.37)$$

булардаги

$$k^2 = \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} E, \theta^2 = \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (V_0 - E). \quad (5.38)$$

Потенциал чуқур соҳаси $0 < x < a$ учун (5.36) тенгламанинг ечими

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (5.39)$$

потенциал тўсиқ соҳаси $-b < x < 0$ учун (5.37) тенгламанинг ечими

$$\psi_2(x) = Ce^{\theta x} + De^{-\theta x} \quad (5.40)$$

кўринишларда бўлади.

Кристалл панжараси даврийлигидан Блох функцияси учун

$$\psi(x+c) = e^{ikc}\psi(x) = e^{i\varphi}\psi(x) \quad (5.41)$$

муносабат ўринли, бунда $\varphi = kc$. Энди (5.40) ечимни (5.41) дан фойдаланиб, $a < x < c$ тўсиқ соҳа учун

$$\psi_2(x) = e^{i\varphi} \left[Ce^{\theta(x-c)} + De^{-\theta(x-c)} \right] \quad (5.40')$$

кўринишда ёза оламиз.

Олинган ечимлар соҳалар чегараларида узлуксиз бўлишлиги, яъни бу чегараларда $\psi_1(x)$ ва $\psi_2(x)$ тўлқин функциялари ҳамда уларнинг ҳосилалари ўзаро тенг бўлишлиги керак.

$x=0$ чегарадаги $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ ва $d\psi_1|_{x=0} = d\psi_2|_{x=0}$ шартлардан:

$$A+B=C+D, \quad (5.42)$$

$$ik(A-B)=\theta(C-D). \quad (5.43)$$

$x=a$ чегарадаги $\psi_1(a)=\psi_2(a)$ ва $d\psi_1/dx|_{x=a}=d\psi_2/dx|_{x=a}$ шартлардан:

$$Ae^{ika}+Be^{-ika}=e^{i\varphi}(Ce^{-\theta b}+De^{\theta b}), \quad (5.44)$$

$$ik(Ae^{ika}-Be^{-ika})=\theta e^{i\varphi}(Ce^{-\theta b}-De^{\theta b}). \quad (5.45)$$

(5.41) - (5.44) тенгламалар системаси A, B, C, D доимийларни аниқлаш имконини беради. Бу система бир жинсли тенгламалар системаси бўлиб, унинг маъноли ечимга эга бўлиши учун ушбу тенгламалардаги A, B, C, D лар олдидаги кўпайтувчилардан тузилган аниқловчи (детерминант) нолга тенг бўлиши керак, яъни

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ ik & -ik & -\theta & \theta \\ e^{ika} & e^{-ika} & -e^{i\varphi-\theta b} & -e^{i\varphi+\theta b} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} & -\theta e^{i\varphi-\theta b} & \theta e^{i\varphi+\theta b} \end{vmatrix} = 0. \quad (5.46)$$

Бу аниқловчини очиб чиқилганда

$$\cos kach\theta b + \frac{\theta^2 - k^2}{2\theta k} \sin kach\theta b = \cos\varphi \quad (5.47)$$

тенглама келиб чиқади.

Бу ифодадаги k ва θ катталиклар [(5.38)га қаранг] электроннинг E энергияси орқали ифодаланганлиги туфайли φ га турли қийматлар бериб, $E(\varphi)$ функцияни, яъни электрон энергиялари спектрини аниқлаш мумкин. Аммо (5.47) тенгламани ечиш мураккаб, у тақрибий ҳисоблашни талаб қилади. Лекин айрим чегаравий ҳолларда жуда яққол натижалар олиш мумкин. Бу ҳолда потенциал тўсиқ кенглиги b ни нолга ($b \rightarrow 0$) ва унинг баландлиги V_0 ни чексизга ($V_0 \rightarrow \infty$) интиштирамиз, аммо bV_0 кўпайтма чекли доимий катталик бўлиб қолади деб ҳисоблаймиз, яъни

$$4\pi^2 mab V_0 / h^2 = P = \text{const}. \quad (5.48)$$

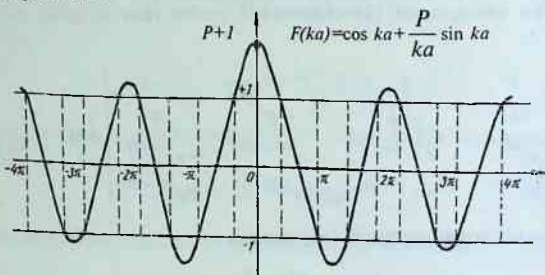
Энди $b \rightarrow 0$ ва $V_0 \rightarrow \infty$ чегаравий ҳолда:

$$\begin{aligned} & \text{ch}\theta b \rightarrow 1, \text{sh}\theta b \rightarrow 0; \\ \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ l' \rightarrow \infty}} \frac{\theta^2 - k^2}{2\theta k} \text{sh}\theta b &= \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ l' \rightarrow \infty}} \frac{\theta^2 - k^2}{2\theta k} \theta b \frac{\text{sh}\theta b}{\theta b} = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ l' \rightarrow \infty}} \frac{b\theta^2}{2k} = \frac{P}{ka}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Бу ҳолда (5.47) тенглама содда кўринишга келади:

$$\cos ka + \frac{P}{ka} \sin ka = \cos \varphi. \quad (5.50)$$

5.2- чизмада (5.50) тенглама ечими график усулда тасвирланган.



5.2-чизма. Шредингер тенгламасининг ечими.

Чизмадан кўриниб турганидек, $\cos \varphi$ нинг қийматлари $+1$ дан -1 гача оралиқдаги қийматларнигина олиши туфайли, фақат шу оралиқда жойлашган соҳалар (5.50) нинг ечимларини ўз ичига олади (чизиқланган соҳалар) мазкур оралиқдан ташқаридаги соҳаларда (5.50) нинг ечимлари бўлмайди.

Шундай қилиб, k нинг бинобарин E нинг қийматлари муайян оралиқда рухсатланган бўлиб, улар орасидаги соҳалар тақиқланган бўлар экан. Демак, Крониг-Пенни модели бир ўлчовли (бир йўналишли) даврий потенциал майдонида ҳаракатланаётган электроннинг энергиялари рухсатланган ва тақиқланган соҳалар (оралиқлар, зоналар)дан иборат бўлишлигини кўрсатади.

Баъзи чегаравий ҳолларда (5.50) қизиқарли натижалар беради.

1) $P \rightarrow \infty$ яъни потенциал тўсиқ жуда баланд. Бу ҳол электронларнинг ўз атомлари билан боғланган ҳолига тўғри келади. $k=0$ бўлганда

$$\cos ka=1, \quad \sin ka/ka=1, \quad F(ka)=P+1$$

бўлишлигини аниқлаш қийин эмас. Демак $P \rightarrow \infty$ $F(ka)$ ҳолда функция k ўққа жуда тик тушади. Бунда электронларнинг рухсатланган энергия соҳалари (зоналари) тор (дискрет сатҳларига мос) бўлади, тақиқланган энергия оралиқлари эса кенг бўлади. Бу ҳол якка атом электрони ҳолатларига мос келади.

2) $P \rightarrow 0$ ҳолда электронлар ўз атомлари билан кучсиз боғланган, потенциал тўсиқ паст бўлади, унда

$$\cos ka = \cos \varphi$$

ва ҳеч қандай тақиқланган соҳалар бўлмайди. Бу ҳол металлдаги эркин электронлар гази ҳолига яқин келади.

3) $P \geq 1$ ҳолда P катта, аммо чекли қийматга эга. 5.2-чизмадан кўринишича k нинг (E энергиянинг) рухсатланган қийматлари $ka = n\pi$ га чапдан ёндашади. Уларни

$$ka = n\pi + \delta \quad (5.51)$$

кўринишда ёзиш мумкин, бунда n — соҳа (зона) тартибини белгиловчи бутун сон, δ — бирдан кичик сон.

Энди электроннинг рухсатланган n — соҳадаги E_n энергияси

$$E_n = A_n + (-1)^n B_n \cos \varphi \quad (5.52)$$

кўринишда ифодаланади, бунда

$$A_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \left(1 - \frac{2}{P}\right), \quad B_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \frac{2}{P} \quad (5.53)$$

(5.52) ифодани келтириб чиқаришда $|\delta| \ll 1$ деб ҳисоблаб, $\cos ka = (-1)^n$, $\sin ka = (\pm i)$ ларни топамиз. (5.50) дан

$\delta = \frac{n\pi}{P} \left[(-1)^n \cos \varphi - 1 \right]$ муносабатни аниқлаймиз. Буни (5.51) ифо-

дага қўйиб, $ka = n\pi \left[1 + \frac{1}{P} (-1)^n \cos \varphi - \frac{1}{P} \right]$ тенгликни ҳосил

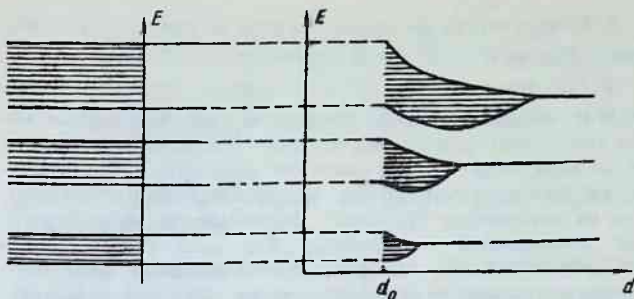
қиламиз. ka нинг бу қийматини (5.8) ифодалардан биринчисига қўйсақ, (5.52) натижа келиб чиқади. (5.52) дан рухсатланган электрон энергиялари соҳасининг кенглиги P га муҳим даражада боғлиқ бўлишлиги кўриниб турибди.

5.5. Идеал кристаллда электрон энергиялари спектри тўғрисида умумий хулосалар

Олдинги бандларда кучсиз, кучли боғланиш ҳолларида бир ўлчовли ҳолда стационар даврий электрик майдонларда (улар кристаллда атомларнинг даврий жойлашишидан вужудга келади) ҳаракатланаётган электрон учун Шредингер тенгламасини адиабатик бир электронли тақрибда ечиб кўрдик. Улар мисолида кристалл қаттиқ жисмда электронларнинг энергетик спектри ҳақида муайян тасаввур ҳосил қилдик. Квант механикаси қонунлари асосида юритиладиган умумий мулоҳазалар бу натижаларни тасдиқлайди. Бу натижаларнинг энг муҳими электронлар энергетик спектрининг зонавий тузилишидир. Шунинг учун ҳам бу назария зоналар назарияси номини олган. Биз куйида унинг асосий хулосаларини баён қиламиз:

Даврий электрик майдонда электроннинг энергиялари спектри рухсатланган ва тақиқланган энергия зоналарига ажралган бўлади. Бунинг асосий сабаби атомлар маълум масофаларгача бир-бирига яқинлашиб қаттиқ жисм ҳосил қилганларида бир-бирлари билан кучли таъсирлашишга киришадилар, бунда якка атомдаги электронларнинг энергия сатҳлари шундай парчаланадикки, бунда Паулининг битта энергия сатҳи иккитадан (бир квант ҳолатида биттадан) ортиқ электрон бўлиши мумкин эмас дейдиган тақиқ қонунига риоя қилган ҳолда, атомдаги бир энергия сатҳи ўрнига (атомлар сонига тенг миқдордаги сатҳларни ўз ичига олган) энергия соҳаси (зонаси) вужудга келади. Рухсатланган зоналар оралиғидаги тақиқланган зоналар кенглиги турли кристалларда турлича, рухсатланган зоналар тузилиши баъзи кристалларда мураккаб, зоналарнинг устма-уст тузилиши ҳодисаси ҳам юз беради. 5.3- чизмада атомдаги айрим сатҳлардан зоналар вужудга келиши тасвирланган. d_0 — атомлараро масофа.

5.3 а- чизмада атомдаги 1,2,3 энергия сатҳларидан, атомлар яқинлашиб кристалл ҳосил қилганида, энергия зоналари вужудга келишини кўраемиз, бунда рухсатланган зоналарни бир-биридан тақиқланган зоналар ажратиб турибди, зоналар устма-уст тушмаган.



5.3-чизма Атомдаги электрон энергиялари сатҳларидан кристалдаги электрон энергиялари зоналари ҳосил бўлиши

5.3. б- чизмада 2,3 сатҳлардан ҳосил бўлган зоналар бир бирини қисман қоплаган.

1. Зоналар тартиб номери ортган сари рухсатланган энергия зоналари кенгайиб тақиқланган зоналар торайиб боради.

2. Рухсатланган зона ичида электроннинг энергияси узилишсиз ўзгаради деб ҳисоблаш мумкин, чунки ҳар бир зона ичида энергия сатҳлари жуда зич жойлашган (зонадаги сатҳлар сони кристалдаги атомлар сони тартибида). Бу ҳол зона ичида электронлар ҳаракатига боғлиқ ҳодисаларни ўрганишда мумтоз қонунлардан фойдаланиш имконини беради.

3. \vec{k} ва $\vec{k}^1 = \vec{k} + \vec{b}_g$ тўлқин вектори тавсифлайдиган

ҳолатлар бир бирига ўхшашдир (бунда \vec{b}_g тескари панжара вектори). Бундан ихтиёрий n — зонадаги электроннинг энергияси \vec{k} нинг даврий функцияси бўлишлиги келиб чиқади:

$$E_n(\vec{k} + \vec{b}_g) = E_n(\vec{k}). \quad (5.54)$$

4. Электрон энергияси \vec{k} тўлқин векторнинг жуфт функцияси бўлади:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k}), \quad (5.55)$$

яъни $E_n(\vec{k})$ энергиянинг ифодасига \vec{k} нинг фақат жуфт даражалари киради.

5. Тўлқин вектор фазосида электрон энергияси $E_n(\vec{k})$ экстремал (энг кичик, энг катта) қийматларга эга бўлади.

$E_n(\vec{k})$ нинг мутлақ катта (максимум) қиймати мазкур энергия зонасининг юқори чегарасини (шипини), мутлақ кичик (минимум) қиймати эса зонанинг пастки чегарасини (тубини) аниқлайди. Мутлақ максимум, мутлақ минимум деб тақдлашимизнинг боиси шуки, мазкур зонада бир неча максимум ва минимумлар бўлишлиги, айрим кристалларнинг энергия зоналаридаги экстремумлар бир неча қарра айниган бўлишлиги мумкин. Масалан, галлий арсениди GaAs нинг юқориги зонасида иккита минимум бор. Кремний кристаллининг валент зонасида уч қарра айниган максимум мавжуд.

6. Тўлқин вектор \vec{k} қийматларининг шундай соҳалари борки, бу соҳаларда электронлар энергияси узилишсиз ўзгаради (рухсатланган зоналар), аммо уларнинг чегарасида эса узилиш содир бўлади; бу соҳалар *Бриллюэн зоналари* дейилади. Биринчи Бриллюэн зонаси $-\pi \leq \vec{k} \cdot \vec{a}_i \leq +\pi$ тенгсизликлар, иккинчи Бриллюэн зонаси $-2\pi \leq \vec{k} \cdot \vec{a}_i \leq -\pi$ ва $+\pi \leq \vec{k} \cdot \vec{a}_i \leq +2\pi$ тенгсизликлар билан ифодаланади. Барча юқори тартибли Бриллюэн зонасини геометрик кўчиришлар ёрдамида биринчи зонага келтириш мумкин. Шунинг учун уни келтирилган Бриллюэн зонаси дейилади. Бриллюэн зоналари шакли кристаллар тузилишини акс эттиради.

5.6. Электронларнинг кристаллдаги эффектив массаси.

Ковак. Электрон энергияси ва импульси

Электронларнинг кристаллдаги рухсатланган энергиялари зоналарида унинг $E_n(\vec{k})$ энергияси \vec{k} нинг муайян қийматларида экстремумларга (максимум ва минимумларга) эга бўлишлиги тўғрисида юқорида айтилган эди. $E_n(\vec{k})$ функцияни экстремумлари яқинида қаторга ёйиш мумкин. Бу айрим қаттиқ жисмлар учун аҳамиятга эга эканлигини кейинроқ кўраимиз. Масалан, n — зонада $E_n(\vec{k})$ энергия $\vec{k} = \vec{k}_0$ да экстремал қиймат олади дейлик. Шу $\vec{k} = \vec{k}_0$ яқинида $E_n(\vec{k})$ ни қаторга ёйдик:

$$\begin{aligned} \bar{E}_n(\bar{k}) &= \bar{E}_n(\bar{k}_0) + \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial E_n}{\partial k_{\alpha}} \right)_{\bar{k}_0} (k_{\alpha} - k_{\alpha 0}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \right)_{\bar{k}_0} (k_{\alpha} - k_{\alpha 0})(k_{\beta} - k_{\beta 0}) + \quad (5.56) \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \left(\frac{\partial^3 E_n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta} \partial k_{\gamma}} \right)_{\bar{k}_0} (k_{\alpha} - k_{\alpha 0})(k_{\beta} - k_{\beta 0})(k_{\gamma} - k_{\gamma 0}) + \dots, \end{aligned}$$

$k_{\alpha}, k_{\beta}, k_{\gamma} - k$ векторнинг, $k_{\alpha 0}, k_{\beta 0}, k_{\gamma 0} - k_0$ векторнинг ташкилловчилари. $E_n(\bar{k})$ энергия $\bar{k} = \bar{k}_0$ да экстремал қиймат олгани учун биринчи $(\partial E_n / \partial k_{\alpha})_{\bar{k}_0}$ ҳосилалар нолга тенг. Иккинчи тартибли ҳосилалар ҳадлар 2-даражали тензорни ташкил қилади. Юқори тартибли ҳосилалар кирган ҳадлар жуда кичиклиги туфайли ҳисобга олинмайди. Энди (5.56) ёйилма яхши тақрибда

$$\bar{E}_n(\bar{k}) = \bar{E}_n(\bar{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \right)_{\bar{k}_0} (k_{\alpha} - k_{\alpha 0})(k_{\beta} - k_{\beta 0}). \quad (5.57)$$

Агар тескари масса ўлчамлигига эга бўлган тескари эффектив масса тензори

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \right)_{\bar{k}_0} \quad (5.58)$$

тушинчаси киритилса, (5.57) анча содалашади:

$$E_n(\bar{k}) = E_n(\bar{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{(k_{\alpha} - k_{\alpha 0})(k_{\beta} - k_{\beta 0})}{m_{\alpha\beta}} \quad (5.59)$$

Тензорни учта бош ўққа келтириш амали бу ифодани яна ҳам содалаштиради:

$$E(\bar{k}) = E(\bar{k}_0) + \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 (k_{\alpha} - k_{\alpha 0})}{m_{\alpha}}. \quad (5.60)$$

Агар бу ифодани эркин электрон кинетик энергияси учун ёзилган $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ билан солиштирсак m_{α} масса маъносига эга

эканлигини пайқаймиз, аммо, умумий ҳолда, кристаллнинг ҳар бир бош ўқига ўзининг m_α массаси тўғри келади:

$$m_\alpha = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha^2} \right)_{\vec{k}_0} \quad (5.61)$$

Энг содда ҳолда (изотроп кристаллда) учала массалар бирдай бўлади:

$$m_1 = m_2 = m_3 = m^* = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)_{\vec{k}_0} \quad (5.62)$$

Бу ифодадаги m^* скаляр эффектив масса дейилади. Бу ҳолда электроннинг энергияси, квази импульси ва Ньютоннинг иккинчи қонуни кўриниши қуйидагича бўлади:

$$E_n(\vec{k}) = [\hbar^2 (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 / 2m^*] + E_n(\vec{k}_0), \quad (5.63)$$

$$\vec{P} = \hbar(\vec{k} - \vec{k}_0) = m^* \vec{v}, \quad (5.64)$$

$$\vec{F} = m^* (d\vec{v} / dt) = d\vec{p} / dt. \quad (5.65)$$

Энергия зонасининг пастки чегарасида (мутлақ минимумида) $E_n(\vec{k})$ нинг иккинчи ҳосиласи мусбат, яъни $m^* = \hbar^{-2} (\partial^2 E_n / \partial k^2)_{\vec{k}_0} > 0$. Бу осон тушунарли натижадир. Зонанинг юқориги чегарасида эса $(\partial^2 E_n / \partial k^2)_{\vec{k}_0} < 0$ яъни $m^* < 0$. Аммо бу ғалати натижани тушуниш қийин эмас. Электрон кристалл ичидаги кучли майдон таъсирида ташқи майдон таъсири йўналишига қарши йўналган тезланишга эга бўлади (бу зонанинг юқориги чегарасида содир бўлади). Агар зона шипида массаси $m_p = -m^*$ ва заряди $+e$ бўлган квази зарра (ковак) тушунчаси киритилса, мазкур ғалатилик бартараф бўлади. Бу квази зарранинг ковак деб аталишига сабаб у зонанинг ўша жойида электрондан бўш ҳолатни (ковакни) тавсифлашидир. Коваклар эркин электронлар билан биргаликда ярим ўтказгич кристалларда жуда муҳим ўрин тутади.

Таҳлилни соддалаштириш учун $E_n(\vec{k}_0) = 0$ ва $\vec{k}_0 = 0$ деб

фараз қилинади. Эффектив масса тушунчаси $E_n(\vec{k})$ функцияни экстремумлари яқинида қаторга ёйишдан келиб

чиққанлиги ва бинобарин, бу тушунча фақат зоналар чегаралари яқинидагина қўлланиши мумкинлигини таъкидлаймиз.

Скаляр эффектив масса изотроп кристалларга хос, аммо анизотроп кристалл хоссалари тавсифланганда эффектив масса тензори тушунчасидан фойдаланиш керак.

5.7. Энергия зоналари. Металлар. Ярим ўтгазгичлар. Диэлектриклар

Биз юқорида квант физикаси заминида кристалл қаттиқ жисмларда электронларнинг энергия зоналари ҳосил бўлишлигини кўрдик. Энди энергия зоналарининг электронлар билан тўлдирилганлиги масалалари билан танишамиз, чунки юқориги энергия зоналарининг (валент сатҳларидан пайдо бўлган зоналарнинг) қай даражада тўлдирилганлиги ёки тўлдирилмаганлиги кристаллнинг электрик хоссалари бўйича қайси гуруҳга — металларга (яхши ўтгазгичларга) ярим ўтгазгичларга ёки диэлектрикларга мансуб бўлишлигини аниқлаб беради. Дарвоқе, қаттиқ жисм квант физикаси (1930 йиллар бошида) яратилгандан кейингини мазкур моддаларнинг асос хоссаларини ва улар орасидаги тафовутни пухта илмий кўсда тушуниш мумкин бўлди.

Умуман, энергия зонаси электронлар билан тўла тўлдирилган, чала тўлдирилган ёки бутунлай тўлдирилмаган бўлиши мумкин.

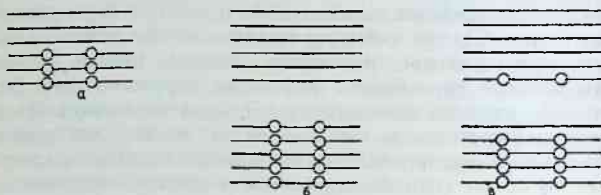
Агар энергия зонасини электронлар тўла тўлдирган бўлса (боғланган электронлар зонаси) бу ҳолда ундаги электронлар электр токда қатнаша олмайди. Сабаби шуки, бу зонанинг ҳар бир сатҳида бир хил қийматли тезликка эга бўлган икки электрон қарама-қарши йўналишда ҳаракат қилади. Токда қатнаштириш учун бундай жуфтларни ажратиш уларни бир қисмини юқорига бўш сатҳларга (агар улар мавжуд бўлса) кўтариш (энергиясини ошириш) ва энг муҳими электронлар йўналишини электр майдонга мос равишда буриш, яъни уларнинг йўналган (тартибли) ҳаракатини вужудга келтириш керак. Аммо тўла тўлдирилган зонада бўш сатҳлар йўқ, электр майдон таъсир қилганида ҳам электронлар иккитадан ўз сатҳларида қарама-қарши ҳаракат қилишда давом этади. Шунинг учун улар токда қатнаша олмайди.

Агар энергия зонаси чала тўлдирилган бўлса, уни ўтказувчанлик зонаси дейилади. Бундай зона электронлари токда қатнаша олади. Улар ўтказувчанлик электронлари ёки эркин электронлар дейилади. Мазкур зонанинг юқори қисмида бўш сатҳлар бор, паст сатҳларида жуфт-жуфт жойлашган электронлар электр майдон таъсирида тезлашиб юқориги бўш сатҳларга кўтарилади, тезликлари йўналишлари электр майдонга мос бурилади. Натижада зонадаги электронларнинг йўналган ҳаракати, яъни электр ўтказувчанлик вужудга келади (бунда занжир ёпиқ бўлишлигини назарда тутилади).

Тўлдирилган зона юқорисида пастки зонадан тақиқланган зона билан ажратилган бўш зона бўлади. Агар қандайдир ташқи таъсир (температура, кучли электр майдон, ёруғлик таъсири) оқибатида бу зонага тўлдирилган зонадан электронлар ўтса бу икки зона ҳам чала тўлдирилган бўлиб қолади ва электр майдон ҳосил қилганда токка ўз ҳиссаларини қўшади.

Икки муҳим ҳолни кўриб чиқайлик.

1. Чала тўлдирилган валент зона ҳоли. Натрий Na кристаллини олайлик. Натрий элементлар даврий жадвалида 11-ўринда туради, унинг атомида 11 та электрон бор. Уларнинг 10 таси, Паули қонунига асосан 2 тадан 5 та сатҳни тўла эгаллаган, 11-электрон жойлашган валент сатҳ чала (яримиси) тўлдирилган. Натрий 1 валентлик элемент. Тўла тўлдирилган 5 та ички сатҳлардан натрий кристаллида ҳосил бўлган энергия зоналари ҳам тўла тўлдирилган, аммо валент сатҳдан пайдо бўлган зонанинг ярми тўлдирилган бўлади (5.4- а чизма).



5.4-чизма. Энергия зоналарининг электронлар билан тўлдирилиш ҳоллари.

Ҳар қандай температурада тўла тўлдирилган зонадаги электронлар электр токини ўтказишда қатнаша олмайди, аммо ярми тўлдирилган зонанинг (ўтказувчанлик зонасининг) элек-

тронлари токда қатнаша олади, чунки уларни электр майдон тезлантириб юқориги бўш сатҳларга (тезлик йўналишини ҳам ўзгартирган ҳолда) ўтказиши мумкин. Бу зонадаги электронларнинг тартибли ҳаракати вужудга кела олади. Натрий кристалли металл бўлиб, токни яхши ўтказадиган моддадир. Демак, юқориги энергетик зонаси электронлар билан ярмиси (чала) тўлдирилган моддалар металл хоссаларига эга бўлади. Бундай зонадаги эркин электронлар сони кристаллни ташкил қилган атомлар сони тартибида (бир см³ да тахминан 10²² та чамасида) бўлади. Металлар яхши ўтказгичлар.

Яна шунга айтиш зарур: атомда тўла тўлдирилган валент сатҳдан ва ундан юқориги бўш сатҳдан кристаллда пайдо бўладиган икки зона қисман бир бири устига тушганда ҳам (5.3,б- чизмани қ.) ушбу зоналарнинг юқориги қисмида бўш сатҳлар оралиғи мавжуд бўлади. Бу ҳолда ҳам электр майдон таъсирида электронларни тезлаштириб, юқорига бўш сатҳларга ўтказиш уларни токда қатнаштириш мумкин. Бундай моддалар ҳам металлар бўлади.

2. Тўла тўлдирилган валент зона ҳоли. Кремний кристаллини олайлик. Кремний Si элементлар даврий жадвалида 14-ўринда туради. Бинобарин, унинг якка атомида 14 та электрон бўлиб, 10 таси мустақкам ички қобиқда 5 та сатҳни тўлдирган, қолган 4 таси 2 та валент сатҳни тўла тўлдирган. Кремний энг катта валентлиги 4 га тенг бўлган элемент, чунки унинг шу 4 та электрони кимёвий бириктишларда қатнашиши мумкин.

Валент сатҳлардан кремний кристаллида пайдо бўлган валент зоналар мутлақ нол температурада тўлдирилган бўлади (5.4,б-чизма). Демак, $T=0$ К да бу зоналардаги электронлар электр токини ўтказишда қатнаша олмайди, яъни кремний бу ҳолда ўзини диэлектрик (изолятор) каби тутати. Валент зонадан юқоридаги зона (у валент сатҳдан юқориги уйғониш сатҳдан пайдо бўлади) бўм-бўш бўлади. Бу зона ўтказувчанлик зонаси дейилади. Бу номнинг келиб чиқишини ҳозир билиб оламиз. Биз бундан кейин икки валент зонадан фақат битта юқоригиси билан иш қиламиз, чунки пастки валент зона аксарий ҳолда кремнийда содир бўладиган ҳодисаларда ҳеч қандай ҳиссага эга эмас.

Температура мутлақ нолдан (0К дан) юқори бўлганда зоналар тўлдирилганлиги қанақа бўлади?

Бу ҳолда ($T > OK$) валент зона электронларидан бир қисми, ниссиқлик ҳаракати энергияси ҳисобига тақиқланган зона кенглиги деб аталган E_g энергетик тўсиқни енгиб, юқориги зонага яъни ўтказувчанлик зонасига ўтиб олган бўлади (5.4, в-чизма). Бу ҳодисани яққол тасаввур қилиш учун уни сууюқлик молекулаларини буг молекулаларига айланишига ўхшатиш мумкин. Энди валент зона ҳам, ўтказувчанлик зонаси ҳам чала тўлдирилган зоналар бўлади. Улардаги электронлар электрик майдон таъсирида банд бўлмаган юқориги сатҳларга ўтиши (энергияни ва тезлик йўналишини ўзгартириши) яъни ток ўтказишда қатнашиши мумкин. Қисман тўлдирилган ўтказувчанлик зонасидаги электронлар олдин айтилганидек, *эркин электронлар ёки ўтказувчанлик электронлари* дейилади. Улар мувозанат ҳолатида зонанинг тубида жойлашади.

Валент зонадаги коваклар. Ўтказувчанлик зонасига ўтиб кетган электронлар валент зонанинг юқориги чегараси яқинидаги сатҳларини бўш қолдиради. Албатта, электр майдон таъсирида пастроқ сатҳлардаги электронлар бу бўш сатҳларга ўтиб олиши мумкин. 5.6-бандда кўрганимиздек зонанинг юқориги чегараси яқинида электроннинг ташқи ва ички электр майдон таъсиридаги ҳаракатини $m_p^* > 0$ массали ва +е зарядли квази зарра – ковакнинг ҳаракати орқали тавсифлаш мумкин. Хуллас, валент зонанинг юқориги чегараси яқинида электрон бўшатиб кетган ҳолатни ковак банд қилган деб ҳисобланади. Электрон зарядига тескари зарядли ковак электрик майдон таъсирида электронлар ҳаракати йўналишига қарама қарши йўналишда ҳаракатланади, токда қатнаша олади. Коваклар энергияси юқоридан пастга томон ошиб боради!

Демак, $T > O$ K да кремний кристалли электр ўтказувчанликка эга бўлади, уни ўтказувчанлик зонасидаги эркин электронлар, валент зонадиги коваклар амалга оширади. Эркин электронлар ва ҳаракатчан коваклар миқдори (ўтказувчанлик ҳам) тақиқланган зонанинг E_g кенглиги (энергетик тўсиқ баландлигига) боғлиқ бўлади. Ҳар хил кристаллар учун E_g нинг қиймати турлича бўлади. Шартли равишда ярим ўтказгичларда $E_g \leq 2$ эВ, диэлектрикларда $E_g > 2$ эВ бўлади.

Бироқ, ярим ўтказгичларда токда қатнаша оладиган заряд ташувчилар зичлиги металлдагидан анча кам, мос равишда электрик ўтказувчанлик анча кичик бўлади. E_g си катта

бўлган диэлектриклар ўтказувчанлиги, заряд ташувчилар жуда ҳам кам (баъзан, ҳисобга олмаслик даражада) бўлганлиги туфайли, жуда ҳам кичкина бўлади, кўп ҳолларда уни йўқ деб ҳисобланади.

Температура ошиб борганида металлларнинг ўтказувчанлиги камаяди (қаршилиги ортади), чунки металллардаги эркин электронлар зичлиги катта ва температурага боғлиқ эмас, лекин температура ошган сари электронлар ҳаракатчанлиги камаяди.

Ярим ўтказгичларда температура ошганида электр ўтказувчанлик тез ортиб боради, чунки валент зонадан электронларнинг ўтказувчанлик зонасига ўтишлари тез кўпаяди, бинобарин, токда қатнашувчи эркин электронлар ва ҳаракатчан коваклар зичлиги тез ортади, ҳаракатчанликлари эса нисбатан суст ўзгаради. Ярим ўтказгичлар, металллардан кўра, температурадан ташқари яна ёритишга, деформацияларга, турли нурланишларга нисбатан жуда сезгир моддалардир.

Яна бир муҳим фикрни айтиб ўтиш зарур. Ярим ўтказгичларда энергия зоналаридаги сатҳларга нисбатан эркин заряд ташувчилар зичлиги анча (баъзан миллионларча) кам, шунинг учун улар зоналар чегараларидаги кичик оралиқдаги сатҳларда жойлашган бўлади: ўтказувчанлик зонасидаги электронлар зонанинг туби ($E_n(\vec{k})$ энергия минимуми) яқинида, валент зонадаги коваклар эса зонанинг шипи ($E_n(\vec{k})$ энергия максимуми) яқинида жойлашган бўлади. Демак, 5.6-бандда $E_n(\vec{k})$ энергиянинг экстремумлар яқинидаги ёйилмасидан келтириб чиқарилган эффектив масса тушунчаси мазкур электронлар ва ковакларга жуда катта аниқликда қўлланиши мумкин.

Металлар, ярим ўтказгичлар, диэлектрикларга бағишланган бобларда зоналар назариясининг махсус тушунчаларига тўхталинади.

Шундай қилиб, қаттиқ jisимлар квант физикаси энергия зоналари назарияси заминида металл, ярим ўтказгич ва диэлектрик моддаларнинг электрик ва бошқа хоссаларини равшан тушинтириб беради.

Саволлар ва масалалар

1. Кристалл қаттиқ жисм учун Шредингер тенгламаси қандай ёзилади?
2. Адиабатик тақриб нимадан иборат?
3. Бир электронли тақрибнинг мазмуни қандай?
4. Крониг-Пенни модели нима ва у қандай хулосага олиб келади?
5. Блох функциясини тавсифланг.
6. Кремний кристаллида $m_1=1,55 m_0$, $m_2=m_3=0,082m_0$ (бунда m_0 – эркин электрон массаси).

$$\frac{3}{m'} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \text{ифодадан } m' \text{ массани топинг.}$$

VI БОБ

ҲАҚИҚИЙ КРИСТАЛЛ ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРДАГИ НУҚСОНЛАР

6.1. Кристаллардаги нуқсонлар ҳақида умумий мулоҳазалар

Олдинги бобларда қаттиқ кристалл жисми мутлақ тартибланган, яъни атомларнинг қатъий даврий жойлашишида ҳеч қандай бузилиш бўлмаган жисм деб қаралди. Фақат атомлар тебраниши бундан истисно эди.

Лекин, ҳақиқий кристалларда ҳамма вақт кристалл панжарасининг анча миқдордаги бузилиши (нуқсонлари) мавжуд бўлади. Даставвал макро ва микро нуқсонларни фарқлаш лозим. Макронуқсонлар микроскопда осон кўринади. Бундай макронуқсонларнинг мисоллари — металл қуймалардаги коваклар, дарзлар, ёт моддалар киришмалари уюмлари, поликристаллнинг доначалари — айрим кристаллчаларнинг кўринма чегараларидир. Электронлар микроскопиясининг пайдо бўлиши санаб ўтилган нуқсонларни анча кичик ўлчамли бўлганда ҳам кузатиш имконини берди.

Микронуқсонларга ёки атомлар ўлчамида қараладиган нуқсонларга уч ўлчамдан (x, y, z) ҳеч бўлмаганда бири кристалл панжарасининг $a = 0,2 \div 0,5$ нм даври билан таққосланувчи бўлган нуқсонлар мансуб бўлади. Айрим кўринишдаги нуқсонларни қарашдан олдин ҳақиқий кристаллни нуқсонсиз (идеал) кристаллдан фарқловчи умумий белгиларни топайлик.

Идеал кристаллда атомлар қатъий даврий жойлашганлиги оқибатида кристалл ичида даврий электрик майдон шакланган бўлади. Кристаллнинг даврий ички электр майдонининг ҳар қандай бузилиши нуқсон бўлади. Нуқсонлар мисоли тариқасида ёт атом — киришманинг кристалл атоми ўрнига жойлашиб олиши ва кристалл атомининг жойидан кетиши — вакансия (бўш жой) ҳосил бўлишини келтириш мумкин.

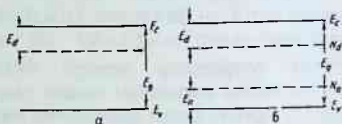
Агар кристаллдаги нуқсонлар оз бўлса, бу ҳолда улар бир-биридан анча йироқда жойлашган, яъни кристалл панжараси нуқсонлари маҳаллийлашган бўлади. Бунда кристалл ичидаги электр майдон фақат нуқсон атрофидагина бузилади, бошқача айтганда, кристаллнинг даврий V_0 потенциалига нуқсон яқинида V' қўшимча потенциал қўшилади, тўла потенциал $V = V_0 + V'$ бўлади. Шунинг учун ҳам фақат шу соҳада бўлган электронларнинг энергетик ҳолатлари ўзгаради, бу эса идеал қаттиқ жисм электронлари энергия зоналарига қўшимча маҳаллий энергетик ҳолатларнинг пайдо бўлишига олиб келади. Бундай маҳаллий ҳолатлар сони N нуқсонлар сонига тенг, ёки агар бир нуқсон бир неча ҳолатда бўла олса, маҳаллий ҳолатлар сони нуқсонлар сонидан катта бўлади.

Маҳаллий энергетик сатҳлар (ҳолатлар)да электронлар боғланган, бу боғланиш турли қаттиқ жисмларда моҳиятан турличадир. Металларда нуқсонлар пайдо қилган сатҳлар рухсат қилинган энергиялар зонаси ичида жойлашади. Металларда электронлардан бўш нуқсонларнинг ионланган ҳолатда бўлишлиги энг эҳтимоллигидир.

Ярим ўтказгичлар ва диэлектриклар электронлари тақиқланган энергиялари зонаси бўлган энергетик спектрга эгадир. Албатта, бундай кристалларда маҳаллий энергетик ҳолатлар рухсатланган зоналарга тушиши мумкин. Агар улар ўтказувчанлик зонасида жойлашса, уларни **резонанс сатҳлар**, агар улар валент зонасида жойлашса, уларни **анти резонанс сатҳлар** дейилади. Бу ҳолларда нуқсонларга тегишли электронлар улар билан боғланишини йўқотади ва умумлашган

зона электронлари жамоасига қўшилади. Лекин, аксарий кўп ҳолларда нуқсонлар сатҳларида жойлашган электронлар нуқсонларга боғлиқлигича қолиши мумкин, уларни фақат иссиқлик ҳаракати

ёки бошқа энергия манбаи ҳисобига ўз нуқсонларидан ажратиб юбориш — активлантириш мумкин. Нуқсонларга боғлиқ электронлар электр ўтказувчанликда қатнаша олмайди, албатта. Бундай нуқсонларнинг электронлар учун сатҳлари ярим ўтказгичнинг (диэлектрикнинг) тақиқланган зонасида жой-



6.1-чизма. Тақиқланган зонадаги маҳаллий сатҳлар

лашган бўлади. Бу 6.1- чизмада кўрсатилган. Қайси бир манбадан олинган энергия эвазига нуқсонлар ионланади? Бир хиллари ўтказувчанлик зонасига электронлар бериб, ўзлари мусбат зарядли нуқсонларга (6.1, а- чизма), бошқа хиллари, аксинча, электронларни тутиб олиб, манфий зарядли нуқсонларга (6.1, б- чизма) айланади.

Ўтказувчанлик зонасига электронлар бера оладиган нуқсонларни донорлар дейилади, таркибида донорлар бўлган ярим ўтказгичларни эса электрон ўтказувчанликли яримўтказгичлар ёки n – тур ярим ўтказгичлар дейилади. Мос равишда ярим ўтказгичларнинг ўтказувчанлик зонасидаги электронлар кўчиши билан боғлиқ электр ўтказувчанликни электрон электр ўтказувчанлик ёки n – тур ўтказувчанлик дейилади.

Агар кристаллни қиздирганда электронлар валент зонадан нуқсонлар сатҳларига ўта олса, бу ҳолда валент зонада ҳаракатчан мусбат зарядли коваклар пайдо бўлади, ковак электр ўтказувчанлик вужудга келади. Электронларни ўзига қабул қиладиган нуқсонларни акцепторлар деб аталган, таркибида акцепторлар бўлган ярим ўтказгични эса ёки ковак ўтказувчанликли ярим ўтказгич ёки p – тур ярим ўтказгич дейилади.

6.1- чизмада донорлар сатҳлари ўтказувчанлик зонаси туби яқинида, акцепторлар сатҳлари эса – валент зона шипи яқинида тасвирланган. Хусусий ионланишга нисбатан нуқсонлар ионланиши анча осон, кичикроқ температураларда юз беради. Сатҳларнинг донор ёки акцептор бўлишлиги мазкур сатҳларни ҳосил қилувчи нуқсонларнинг табиатига боғлиқ.

Донорлар электронларни фақат ўтказувчанлик зонасига эмас, балки акцептор табиатли ҳар қандай нуқсонга бера олади. Акцепторлар электронларни валент зонадан қабул қилиш билан бир вақтда кристаллдаги ҳар қандай донордан ҳам олиши мумкин.

Ниҳоят, амфотерлик хоссалари намоён бўладиган, яъни донор ҳам, акцептор ҳам бўла оладиган табиатли нуқсонлар мавжуд. Нуқсонларни синфларга ажратиш кристалл майдонининг нуқсон томонидан бузилиши ўлчамларига асосланган:

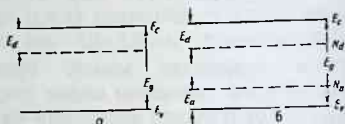
А) нуқтавий (нол ўлчовли) нуқсонлар, уларга ўлчамлар $x(a, y) \langle a, z \langle a$ бўлган нуқсонлар мансуб, бунда a – кристалл панжараси доимийси;

Агар кристаллдаги нуқсонлар оз бўлса, бу ҳолда улар бир-биридан анча йироқда жойлашган, яъни кристалл панжараси нуқсонлари маҳаллийлашган бўлади. Бунда кристалл ичидаги электр майдон фақат нуқсон атрофидагина бузилади, бошқача айтганда, кристаллнинг даврий V_0 потенциалига нуқсон яқинида V' қўшимча потенциал қўшилади, тўла потенциал $V = V_0 + V'$ бўлади. Шунинг учун ҳам фақат шу соҳада бўлган электронларнинг энергетик ҳолатлари ўзгаради, бу эса идеал қаттиқ жисм электронлари энергия зоналарига қўшимча маҳаллий энергетик ҳолатларнинг пайдо бўлишига олиб келади. Бундай маҳаллий ҳолатлар сони N нуқсонлар сонига тенг, ёки агар бир нуқсон бир неча ҳолатда бўла олса, маҳаллий ҳолатлар сони нуқсонлар сонидан катта бўлади.

Маҳаллий энергетик сатҳлар (ҳолатлар)да электронлар боғланган, бу боғланиш турли қаттиқ жисмларда моҳиятан турличадир. Металларда нуқсонлар пайдо қилган сатҳлар рўхсат қилинган энергиялар зонаси ичида жойлашади. Металларда электронлардан бўш нуқсонларнинг ионланган ҳолатда бўлишлиги энг эҳтимоллигидир.

Ярим ўтказгичлар ва диэлектриклар электронлари тақиқланган энергиялари зонаси бўлган энергетик спектрга эгадир. Албатта, бундай кристалларда маҳаллий энергетик ҳолатлар рўхсатланган зоналарга тушиши мумкин. Агар улар ўтказувчанлик зонасида жойлашса, уларни **резонанс сатҳлар**, агар улар валент зонасида жойлашса, уларни **анти резонанс сатҳлар** дейилади. Бу ҳолларда нуқсонларга тегишли электронлар улар билан боғланишини

йўқотади ва умумлашган зона электронлари жамоасига қўшилади. Лекин, аксарий кўп ҳолларда нуқсонлар сатҳларида жойлашган электронлар нуқсонларга боғлиқлигича қолиши мумкин, уларни фақат иссиқлик ҳаракати



6.1-чизма. Тақиқланган зонадаги маҳаллий сатҳлар

ёки бошқа энергия манбаи ҳисобига ўз нуқсонларидан ажратиб юбориш — активлантириш мумкин. Нуқсонларга боғлиқ электронлар электр ўтказувчанликда қатнаша олмайди, албатта. Бундай нуқсонларнинг электронлар учун сатҳлари ярим ўтказгичнинг (диэлектрикнинг) тақиқланган зонасида жой-

лашган бўлади. Бу 6.1- чизмада кўрсатилган. Қайси бир манбадан олинган энергия эвазига нуқсонлар ионланади? Бир хиллари ўтказувчанлик зонасига электронлар бериб, ўзлари мусбат зарядли нуқсонларга (6.1, а- чизма), бошқа хиллари, аксинча, электронларни тутиб олиб, манфий зарядли нуқсонларга (6.1, б- чизма) айланади.

Ўтказувчанлик зонасига электронлар бера оладиган нуқсонларни донорлар дейилади, таркибида донорлар бўлган ярим ўтказгичларни эса электрон ўтказувчанликли яримўтказгичлар ёки n – тур ярим ўтказгичлар дейилади. Мос равишда ярим ўтказгичларнинг ўтказувчанлик зонасидаги электронлар кўчиши билан боғлиқ электр ўтказувчанликни электрон электр ўтказувчанлик ёки n – тур ўтказувчанлик дейилади.

Агар кристаллни қиздирганда электронлар валент зонадан нуқсонлар сатҳларига ўта олса, бу ҳолда валент зонада ҳаракатчан мусбат зарядли коваклар пайдо бўлади, ковак электр ўтказувчанлик вужудга келади. Электронларни ўзига қабул қиладиган нуқсонларни акцепторлар деб аталган, таркибида акцепторлар бўлган ярим ўтказгични эса ёки ковак ўтказувчанликли ярим ўтказгич ёки p – тур ярим ўтказгич дейилади.

6.1- чизмада донорлар сатҳлари ўтказувчанлик зонаси туби яқинида, акцепторлар сатҳлари эса – валент зона шипи яқинида тасвирланган. Хусусий ионланишга нисбатан нуқсонлар ионланиши анча осон, кичикроқ температураларда юз беради. Сатҳларнинг донор ёки акцептор бўлишлиги мазкур сатҳларни ҳосил қилувчи нуқсонларнинг табиатига боғлиқ.

Донорлар электронларни фақат ўтказувчанлик зонасига эмас, балки акцептор табиатли ҳар қандай нуқсонга бера олади. Акцепторлар электронларни валент зонадан қабул қилиш билан бир вақтда кристаллдаги ҳар қандай донордан ҳам олиши мумкин.

Ниҳоят, амфотерлик хоссалари намоён бўладиган, яъни донор ҳам, акцептор ҳам бўла оладиган табиатли нуқсонлар мавжуд. Нуқсонларни синфларга ажратиш кристалл майдонининг нуқсон томонидан бузилиши ўлчамларига асосланган:

А) нуқтавий (нол ўлчовли) нуқсонлар, уларга ўлчамлар $x(a, y \langle a, z \langle a$ бўлган нуқсонлар мансуб, бунда a – кристалл панжараси доимийси;

Б) чизиғий (бир ўлчовли) нуқсонлар, икки йўналишда уларнинг ўлчамлари кичик ($<a$) ва учинчи йўналишда ўлчами ҳар қанча бўлиши ($>>a$) мумкин;

В) ясси (икки ўлчовли) нуқсонлар, уларнинг бир йўналишда ўлчами кичик, холос.

Г) ҳажмий (уч ўлчовли) нуқсонлар, уларнинг баъзилари макро нуқсонларга тааллуқли бўлади.

Бу ўлчамлар бўйича синфлашга бир неча бир хил ёки ҳар хил содда нуқсонларнинг бирлашмасидан иборат мураккаб нуқсонларни ҳам киритиш мумкин.

У ёки бу нуқсон пайдо бўлишида ўринли бўладиган тартибсизланиш авзойига қараб ҳам нуқсонларни бошқача синфларга ажратилади. Аввало улар хусусий тартибсизланиш нуқсонлари бўлиб, уларнинг энг муҳим мисоллари электрон ва атомга оид нуқсонлардир. Улар қаттиқ жисмлардаги диффузия, эритмалар парчаланиши ва бошқа ҳодисалар иштирокчиларидир.

Бу синфга ҳаракат нуқсонлари, йўналганлик нуқсонлари, экситонлар, электрон – ковак жуфтлар, фононлар ва поляронлар мансубдир.

Киришма атомлар мавжуд бўлишига боғлиқ бўлган тартибсизланиш нуқсонлари бошқа синфни ташкил қилади.

6.2. Нуқтавий нуқсонлар

Нуқтавий нуқсонларнинг қаттиқ жисмда ҳамма вақт мавжуд бўладиганлари атомлардан бўшаб қолган тугунлар – вакансиялар ва тугунлар оралиғига жойлашиб олган атомлардир.

Вакансияларнинг мувозанат шароитида ҳосил бўлиши кристалл атомларининг иссиқлик тебранишлари билан боғлиқ. Муътадил температураларда атомлар тебранишларининг ўртача амплитудаси атомлар аро масофа (панжара доимийси)нинг бир неча фоизига етиши мумкин. Тугунлар атрофида тебранувчи атомларнинг энергияси жуда кичикдан то анча катта қийматларга эга бўла олади.

Юқори энергияли атомлар ўз мувозанатий вазиятларидан узоқлашиб кетиши (тугунни ташлаб кетиши), тугунлар оралиғига ўтиши мумкин. Тугунлар оралиғига ўтган атом яна бўш тугунга қайтиши – рекомбинацияланиши мумкин. Лекин, мазкур атом вакансияга энг яқин тугунлар оралиғидан узоқроқдагиларига томон диффузияланиши ҳам мумкин. Шу равишда Френкел нуқсонлари деб аталган вакансия – тугунлараро атом жуфтлари



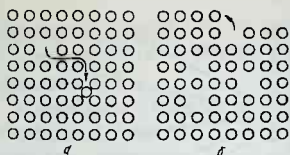
6.2 – чизма. Кристаллнинг тартибсизланиши бўйича нуқсонларнинг синфлари.

вужудга келади. Улар кристалл ҳажмида кўчиб юради, бу дайдиш жараёни бу икки нуқтавий нуқсон қўшни вазиятларда учрашиб, рекомбинация юз бергунча, ёки улардан бири сиртга чиқиб олмагунча давом этади.

Агар вакансия, кристалл бўйлаб диффузияланиб, сиртга чиқса, бу ҳолда унга ичкарироқдаги қатламдаги атом ўтиб олиши мумкин. Пайдо бўлган вакансияга кейинги қатламдаги атом

ўтади ва ҳ.к. натижада тугунлар аро
атомларсиз вакансиялар пайдо
булади. Бу хил вакансияларни
Шотки нуқсонлари дейилади.

Тугунлараро атом кристалл
ҳажмидан сиртга чиққан атомлар
қўшимча қатлам ҳосил қилади,
кристалл ҳажми бир мунча ортади.



6.3-чизма. Френкел(а), Шотки(б)
нуқсонлари.

6.2.1. Металлар ва метал қотишмаларда вакансиялар

Металл кристалларда, айниқса зич тахланган кристалл
панжарали бўлганларида, тугунлар оралиги ўлчамлари кичик
ва уларда атом жойланиши ҳамда бу ораликлар бўйлаб диффу-
зияланиши қийин. Шунинг учун металлларда Шотки вакансия-
лари мавжуд бўлиши эҳтимоллиги каттароқ.

Иккала хил вакансиялар зичлиги даставвал температурага
боглиқ, чунки улар атомларнинг иссиқлик ҳаракати туфайли
пайдо бўлади ва бинобарин, температура ошган сари вакан-
сиялар сони ортиб боради.

Вакансиялар зичлигининг температурага миқдорий
боғланишини топайлик.

1. Дастлаб Шотки нуқсонлари — вакансиялар зичлигини
температурага боғловчи ифодани аниқлаймиз. Қуйидаги бел-
гилашларни қабул қиламиз: $V_{ш}$ — Шотки нуқсони ҳосил
бўлиши энергияси, n — вакант (бўш) тугунлар вакансиялар
зичлиги, N — тугунларда турган атомлар зичлиги бўлсин. У
ҳолда бирлик ҳажмдаги вакансияларни ҳосил қилиш энергияси
 $E = nV_{ш}$.

Статистик физикада исботланишича, системанинг (биз-
нинг ҳолда вакансиялар ва тугунлардаги атомлар системаси-
нинг) энтропияси S билан унинг ҳолатлари эҳтимоллиги W
орасида кўринишдаги боғланиш бор, бундаги W эҳтимоллик
ифодаси:

$$S = k \ln W \quad (6.1)$$

$$W = \frac{(N+n)!}{n!N!} \quad (6.2)$$

Стирлинг тақрибига кўра, $x \gg 1$ бўлганда

$$\ln x! = x \ln x - x \quad (6.3)$$

Биз қараётган системанинг эркин энергияси

$$F = E - TS = nV_{\text{ш}} - kT \ln \frac{(N+n)!}{n!N!} \quad (6.4)$$

Бу ифодадаги логарифмга Стирлинг тақриби (6.3) ни қўлласак,

$$F = E - TS = nV_{\text{ш}} - kT [(N+n) \ln(N+n) - n \ln n - N \ln N]. \quad (6.5)$$

Маълумки, эркин энергиянинг n бўйича ҳосиласи мувозанат ҳолатида нолга тенг, яъни

$$\frac{\partial F}{\partial n} = V_{\text{ш}} - kT \ln \frac{N+n}{n} = 0 \quad (6.6)$$

Металлар учун одатда $V_{\text{ш}} \approx 1$ эВ, бунга мос келадиган вакансияларнинг нисбий сони $n/N \approx 10^{-9}$, демак, бу ҳолда $n \ll N$ бўлади, ва $\ln \frac{N+n}{n}$ ни $\ln N/n$ деб ҳисоблаш мумкин. У ҳолда

(6.6) дан вакансияларнинг

$$n_{\text{ш}} = n = N \exp(-V_{\text{ш}}/kT) \quad (6.7)$$

зичлиги ифодаси келиб чиқади. Бунда N кристалл панжарасидаги барча тугунлар зичлигини билдиради.

(6.7) ифодадан кўринишича, вакансиялар зичлиги n тугунлар зичлигига пропорционал, вакансия ҳосил бўлиш энергияси ($V_{\text{ш}}$) катта бўлганда n кичик бўлади, мазкур зичлик температура ортган сари кўрсаткичли функция сифатида тез ортиб боради. Демак, юқори температураларда вакансиялар миқдори кўнроқ бўлади.

2. Энди Френкел нуқсонлари (вакансиялар ва тугунлараро атомлар жуфтлари) зичлигини аниқлайлик. Шунинини айтиш керакки, Френкел нуқсонлари тенг миқдордаги вакансиялар

ва тугунлараро атомлардан иборат. Масал .н, биз бу ҳолда вакансиялар зичлигини топсак, Френкел нуқсонлари зичлигини топган бўламиз. Бунда биз вакансиялар билан бир қаторда тугунлараро атомларни эътиборга олиб ҳисоблаймиз.

V_ϕ — Френкел нуқсонлари ҳосил бўлиши энергияси (атомнинг ўз тугунидан тугунлар орасига ўтиши энергияси), N — тугунларнинг умумий сони, N' — имконий тугунлараро вакансиялар сони, $E = V_\phi n$ — бу n та нуқсон ҳосил бўлиш энергияси.

Бу ҳолда эҳтимоллик

$$W = \frac{N!}{n!(N-n)!} \frac{N'}{n!(N'-n)!}, \quad (6.8)$$

эркин энергия

$$F = E - TS = V_\phi n - kT \ln W. \quad (6.9)$$

Стирлинг тақрибани қўлласак,

$$F = E - TS = V_\phi n - kT \{ N \ln N + N' \ln N' - 2n \ln n - (N-n) \ln(N-n) - (N'-n) \ln(N'-n) \}. \quad (6.10)$$

Мувозанат ҳолатида

$$\frac{\partial F}{\partial n} = V_\phi - kT \ln \left[\frac{(N-n)(N'-n)}{n^2} \right] = 0 \quad (6.11)$$

(6.11) ифодадан

$$n^2 = (N-n)(N'-n) \exp(-V_\phi/kT). \quad (6.12)$$

Олдинги ҳолда кўрганимиздек, $n \ll N$, N' бўлганлиги тугунларнинг ўнг томонида n ларни ташлаб юборамиз, сўнг квадрат олдимиз. Натижада

$$n = \sqrt{NN'} \exp(-V_\phi/2kT) \quad (6.13)$$

қидирилган ифода ҳосил бўлади.

(6.7) ифодада экспонента кўрсаткичида kT туради, (6.13) ифодада эса $2kT$ туради. Бундан ташқари, N ва N' тафовути ва $V_{ш}$ ҳамда $V_\phi/2$ фарқи ҳисобидан Шотки ва Френкел

нуқсонлари зичликлари бир-биридан анча фарқ қилиши мумкин. Масалан, юқорида айтилгандек, металлларда Шотки нуқсонлари ҳосил бўлиши эҳтимоли каттароқ бўлиб, уларнинг металллар хоссаларига таъсири ҳам каттароқдир.

Шотки нуқсонлари вакансиялардангина иборат бўлганлиги учун $n_{sh} = N_V$ ва $V_{sh} = E_V$ деб ёзиш мумкин; у ҳолда Шотки вакансиялари зичлиги:

$$N_V = N \exp(-E_V/kT) \quad (6.7')$$

кўпчилик адабиётда ёзиладиган кўринишни олади. Биз энди шу ифода билан ишлаймиз. Одатда вакансиялар ҳосил бўлиши энергияси E турли кристаллар учун 1-2 эВ чамасида.

Агар $E_V = 1\text{эВ}$ ва $N = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ деб қабул қилсак, у ҳолда вакансиялар зичлиги температура сайин жуда тез ошиб боришига (6.7') ифода асосида ишонч ҳосил қиламиз:

T, K	0	100	300	500	700	900	1100
$N_V, \text{ см}^{-3}$	0	$2 \cdot 10^{-32}$	$6 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^{14}$	$2 \cdot 10^{16}$	$2 \cdot 10^{17}$

Бу маълумотдан хона температурасида вакансияларнинг мувозанатий зичлиги жуда кичик кўринади. Бироқ, кристаллни бир мунча вақт юқори температурада тутиб турилса, яъни унда кўп миқдорда вакансиялар ҳосил қилинса, сўнгра уни жуда тез совутилса, (буни чиниқтириш дейилади) бор вакансиялар зичлиги ўша юқори температурадагидай қолади. Шу сабабдан бу зичлик олдинги термоншловга, яъни кристаллнинг таржимаи ҳолига ҳам боғлиқ бўлади. Муайян вақт давомида кристаллни қиздириш оқибатида ошиқ миқдордаги вакансияларни йўқ қилиш мумкин. Бу жараёни «қуйдириш» дейилади.

Нуқтавий нуқсонларнинг ҳосил бўлиши фақат температурага эмас, балки босимга ҳам боғлиқ. Унча юқори бўлмаган босимлар соҳасида ушбу ифодадан фойдаланиш мумкин:

$$N_V = N \exp\left[\frac{-E_V + P_V}{kT}\right]. \quad (6.14)$$

Бундаги v — битта Шотки вакансияси пайдо бўлганида кристалл ҳажмининг ўзгариши.

Келгусида металл қотишмаларда вакансиялар ҳосил бўлиши хусусиятларини қараб чиқамиз.

Ўрин эгаллаш тартибланмаган қотишмалар — эритувчи сифатидаги асосий кристаллнинг бир мунча миқдордаги тугун-

ларини бошқа модда (эрувчи) атомлари эгаллаган қаттиқ эритмалардир. Эриган атомлар тасодифон бетартиб тақсимлангани ҳолда қотишмани тартибланмаган дейилади.

Бинар (икки моддадан иборат) А-В қотишмалар энг содда қотишмалардир. Бундай қотишмадаги вакансияларнинг мувоzanатий зичлигини кўрайлик. Шу ҳолда ҳам бу зичлик тоза металллар учун чиқарилган (6.11) ифода кўринишида тасвирланади:

$$N_V = N \exp(-E_V/kT). \quad (6.11)$$

Аммо, тоза металлда E_V энергия фақат қўшни атомларнинг ўзаро таъсири энергияси билан аниқланган бўлса, тартибланмаган ўрин эгаллаш қотишмалар ҳолида қотишманинг бир исмли ва турли исмли атомлари ўзаро таъсир энергиясига боғлиқ бўлади:

$$E_V = \frac{Z}{2} (C_A^2 E_{AA} + C_B^2 E_{BB} + 2C_A C_B E_{AB}). \quad (6.15)$$

Бундаги Z — координацион сон. Бошқача катталиклар куйидагича белгилаб олинган: кристалл панжарасидаги тугунлар сонини N — орқали, улардаги A ва B атомлар сонини N_A ва N_B орқали, вакансиялар сонини олдингидек N_V орқали белгилаб, кейин нисбий зичликлар киритамиз:

$$C_A = N_A/N, \quad C_B = N_B/N, \quad C_V = N_V/N. \quad (6.16)$$

Бу ҳолда

$$N = N_A + N_B + N_V \quad \text{ва} \quad C_A + C_B + C_V = 1. \quad (6.17)$$

Z — координацион сонли панжара учун қотишма энергияси (фақат жуфт таъсирлар ($A-A$, $B-B$, $A-B$) ҳисобга олинган):

$$U = U_0 + \left(\frac{Z}{2N} \right) (C_A^2 E_{AA} + C_B^2 E_{BB} + 2C_A C_B E_{AB}), \quad (6.18)$$

бунда E_{AA} , E_{BB} , E_{AB} атомлар жуфтлари аро таъсир энергиялари. (6.18) ни қайта ёзиб олиш мумкин:

$$U = U_0 + \left(\frac{Z}{2N} \right) (N_A^2 E_{AA} + N_B^2 E_{BB} + 2N_A N_B E_{AB}). \quad (6.18')$$

Энди уч тур зарралар — A ва B атомлар ҳамда вакансиялар учун имконий ўрин алмаштиришлар сони

$$W = N/(N_A! N_B! N_V!) \quad (6.19)$$

бўлади.

(6.7) ва (6.13) ифодаларни ҳосил қилиш йўлидан бориб, (6.15) ифодани ўз ичига олган (6.11) сингари вакансиялар зичлиги муносабатини келтириб чиқарилади.

Тартибланмаган суқулиш қотишмалари – B эрувчининг атомлари A эритувчининг панжараси тугунлари ораларида жойлашган қотишмалардир. Тоза металллар ўрин эгаллаш қотишмалар учун вакансиялар зичлигини ҳисоблаш усули суқулиш қотишмалари ҳолига ҳам қўлланилади.

Вакансиялар турли сондаги B атомлар билан ўралган шaroитда қотишманинг энергияси:

$$U = U_0 + E_{VA} \sum_k N_{V_k} + E_{AB} \sum_k k N_{V_k}, \quad (6.20)$$

бунда E_{VA} — тоза металлда — эритувчида вакансиялар ҳосил бўлиши энергияси, E_{AB} — A ва B атомлар ўзаро таъсир энергияси, k — вакансиялар билан қўшни B атомлар сони, N_{V_k} — k — атомларга қўшни вакансиялар сони.

Бу ҳолда W — эҳтимоллик каттакон математик ифодага эга бўлади. Биз бу ифодаларни қарамаймиз. Эркин энергия ҳосилаларининг нолга тенглигидан (мувозанат шартларидан) фойдаланиб,

$$N_V = \sum_k \frac{N_{V_k}}{N_A} = f(T) \quad (6.21)$$

ифодани топамиз.

(6.21) ифодани ҳисоблаш

$$N_V = \frac{\exp[-E_{VA}/kT]}{1 - N_B} (1 + N_B \{\exp[-E_{AB}/kT] - 1\})^6 \quad (6.22)$$

натижавий муносабатни беради.

6.2.2 Ионлар қаттиқ жисмларида вакансиялар

Ионлардан таркибланган қаттиқ жисмларнинг асосий фарқи уларни кристалл панжарасида катионлар ва анионларнинг тенг миқдорда бўлишлигидир. Шунинг учун агар бу тугун ўрнида вакансия ҳосил бўлса, у ҳолда мусбат ва манфий зарядлар мувозанати бузилади.

Аммо, бу мумкин эмас, чунки кристал бутунича электро-нейтрал бўлиши керак. Электронейтралликнинг зарурлиги ва ионлар кристалли панжарасида у ёки бошқа вакансия ҳосил бўлишидан вужудга келган зарядни мувозанатловчи тескари ишорали заряднинг албатта вужудга келишига олиб келади. Бу шарт турли йўл билан бажарилади. Биринчи йўл тенг миқдорда катион ва анион вакансияларнинг бир вақтда ҳосил бўлишидир. Бу ҳолат Шотки нуқсонларига мос келишлигини пайқаш осон. Зарядлар тенглигига эришининг иккинчи йўли ионлар вакансияларга уларга тенг миқдорда тугунлар оралигида ўша ишорали ионлар пайдо бўлишидир. Бу бирикма Френкел ионлар жуфтнинг ўзидир. Учинчи йўл — узоклаштирилган ионлар зарядини ҳосил бўлган зарядли вакансиялар яқинида қўшимча электронлар пайдо бўлиши ёки уларнинг камайиши орқали мувозанатлашдир. Бу йўл тақиқланган энергия зонаси тор бўлган қаттиқ жисмларда, хусусан, тақиқланган зонаси бўлмаган металлларда эҳтимоллироқ бўлади.

Ион боғланишли ёки ион боғланиш хиссаси анча катта бўлган кўпчилик қаттиқ жисмларнинг (ишқорий-галоид кристаллар, оксидлар, сульфидлар ва бошқаларнинг) тақиқланган зонаси кенглиги анча катта (>2.5) бўлади. Шунинг учун уларда Шотки ва Френкел нуқсонлари кўпроқ ҳосил бўлади.

Ниҳоят, кристаллга унинг хусусий панжарасидаги атомлар валентлигидан фарқ қиладиган валентликли ёт киришма атомлари киритиб зарядларни мувозанатлаш талабини бажариш мумкин.

Ишқорий металллар галогенидларида қарама-қарши зарядланган вакансиялар тенг миқдорда бўлишлиги аниқланган. Вакансиялар зарядини қарама-қарши зарядли тугунлараро хусусий ионлар билан мувозанатлаш, яъни Френкел жуфти ҳосил бўлиши, масалан, кумуш галогенидларида юз беради.

Олдинги бандда Шотки ва Френкел нуқсонлари зичлиги N_{ϕ} , N_V , учун чиқарилган (6.7') ва (6.13) ифодаларни ионлардан таркибланган кристалларга мослаштириш қийин эмас, Шотки нуқсонлари учун чиқарилган N_V нинг ифодаси бу ҳолда ҳам (6.7') дек, аммо E_V нинг қиймати бошқа $N = N_a = N_k$ бўлади, бунда N_a , N_k — мос равишда, анионлар ва катионлар сони.

Ионлар кристалларида Френкел нуқсонлари учун (6.13) ўрнига

$$N_S N_{II} = (N_S - N_{IS}) (N_I - N_{II}) \exp[-U_{\phi}/kT] \quad (6.23)$$

муносабат бажарилади, бунда N_S — панжара тугунлари умумий сони, N_I — панжара тугунлар оралиги умумий сони, N_{IS} — бир хил ионлар панжарасидаги вакансиялар сони, N_{II} — тугунлараро вазиятларга жойлашган атомлар сони, U_{ϕ} — вакансия ва тугунлараро атомдан иборат Френкел нуқсони (жуфти) ҳосил бўлиши энергияси.

Куйида келтирилган маълумот ионлардан таркибланган кристалларда Шотки вакансияси ҳосил бўлиш энергияси катталиклари (E_{VS}) ҳақида тасаввур беради:

Кристалл	LiF	LiCl	LiBr	NaCl	NaBr	KCl	KI	CsCl	CsBr
E_{VS} , эВ	2.51	2.2	1.8	2.28	1.72	2.28	1.60	1.86	2.0

Юқорида қарама-қарши ишорали ионлар сони тенг бўлган (стехиометрик) ионларни қарадик. Аммо, бу тенглик бажарилмайдиган (стехиометриядан четланиш мавжуд бўлган) кристаллар ҳам бор. $A^{III}B^V$ ярим ўтказгичларда стехиометрикликдан четланиш уларнинг амалий қўлланиши учун муҳим аҳамиятга эгадир, чунки B^V ташкилловчининг ортиқчалиги (A^{III} ташкилловчининг камомати) донорлик хоссасига эга, B^V нинг камомати (A^{III} ортиқчалиги) эса акцепторлик хоссасига эга.

6.2.3. Ковалент кристалларда нуқтавий нуқсонлар

Ковалент кристалларнинг энг яхши вакиллари олмос ва олмооссимон ярим ўтказгичлар германий ва кремнийдир. Бу қаттиқ жисмларнинг кристалларида (1.9-чизма) тетраэдр (тўрт ёқли) шаклни ташкил қилган энг яқин қўшни тугунлар оралиги етарлича катта ўлчамли ва бинобарин, атомлар унча зич жойлашмаган. Масалан, тугунлар оралигининг ўлчамлари германийда 0,110 нм ва кремнийда 0,105 нм бўлиб, бу кристаллар тугунларидаги атомларнинг ўз ўлчамларига (мос равишда, 0,122 нм ва 0,117 нм) яқин. Шунинг учун ковалент кристалларда Френкел нуқсонлари кўпроқ бўлишини кутиш мумкин. Тугун атрофида ҳам, тугунлар оралиги атрофида ҳам бирдай миқдорда қўшни атомлар (Ge ва Si да тўртта) бўлишлиги юқоридаги тахминни тасдиқлайди. Бундай кристалларда вакансиялар

ҳамда тугунлар оралигидаги хусусий атомларнинг ҳосил бўлиши энергиялари бир-бирига яқин бўлиши керак.

Олмос тузилишли кристалларда Шотки нуқсонларининг кўпроқ бўлишлиги нуқтаи назари ҳам бор. Мазкур кристалларда нуқсоннинг ҳосил бўлиши уни қуршаб олган атомларни силжитади. Кристалл панжараси симметрияси сақланиб қоладиган силжишларни панжаранинг «релаксацияси» дейилади.

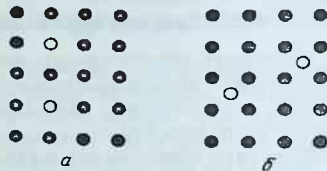
Ковалент кристалларда вакансиялар ҳосил бўлиши, шунингдек улар зичлигининг ўзгариши электронлар зичлиги ўзгариши билан бирга юз беради, лекин металллардан фарқли равишда, бу ўзгаришлар эркин хусусий электронлар миқдори фавқулодда кам бўлган шароитда содир бўлади. Шунинг учун электронлар зичлигини ва ярим ўтказгичнинг у билан боғлиқ бошқа хоссаларини ўлчашлар хусусий нуқтавий нуқсонлар ҳосил бўлиши ва шакл ўзгариши ҳодисаларини ўрганишда қулай усулдир.

6.2.4. Киришмавий нуқтавий нуқсонлар

Киришма ёт атомлар асосий кристалл билан, ё ўрин эгаллаш, ёки суқилиш қаттиқ эритмалари ҳосил қилиш мумкин. Биринчи ҳолда киришма атомлари кристалл панжарасининг тугунларида, иккинчи ҳолда — тугунлар оралиқларида жойлашади (6.4- чизма).

У ё бу турдаги қаттиқ эритманинг ҳосил бўлиши асосан иккита омилга — геометрик ва электрокиёмёвий омилларга боғлиқ.

r_k радиуси асосий атомлар r_a радиусидан 15% дан кам фарқ қиладиган киришма атомларигина ўрин эгаллаш эритмаларини ҳосил қилади (геометрик омил).



6.4-чизма. Кристаллда киришма атомларнинг жойлашishi. а-ўрин эгаллаш эритмаси;

Баъзи кимёвий элементларнинг ковалент радиуслари

Z	Элемент	r г, А
5	B	0,84
8	O	0,74
14	Si	1,17
15	P	1,10
26	Fe	1,20
31	Ga	1,25
32	Ge	1,22
33	As	1,22
47	Ag	1,42
49	In	1,43
79	Au	1,46

Электрокимёвий омил шундан иборатки, ўрин эгаллаш эритмалари ҳосил бўлиши учун киришма атомлари ва асосий атомлар электрокимёвий жиҳатдан ўхшаш бўлиши керак, яъни кимёда маълум бўлган кучланишлар қаторида улар бир-биридан узоқда бўлмаслиги керак.

Агар киришма ва асосий кристалл атомлари кучланишлар қаторида бир – биридан узоқда бўлса, улардан бири ортиқча электромусбат, иккинчиси эса электроманфий бўлса, бу ҳолда кимёвий бирикма ҳосил бўлиши эҳтимоли катта.

Электрокимёвий омилнинг миқдорий ҳарактеристикаси киришма ва асосий атомлар электроманфийлигининг фарқидир.

Ўрин эгаллаш эритмаси ҳосил бўлиши учун бу фарқ кичик бўлмоғи зарур.

6.2.-жадвал

Баъзи кимёвий элементларнинг X электроманфийлиги катталиклари

Z	Элемент	X	Z	Элемент	X	Z	Элемент	X
3	Li	0,95	16	S	2,6	32	Ge	2,0
5	B	2,0	27	Co	1,7	33	As	2,0
8	O	3,5	28	Ni	1,8	47	Ag	1,9
14	Si	1,9	29	Cu (2)	2,0	79	Au	2,3
15	P	2,1	30	Zn	1,6	82	Pb (2)	1,6

Тадқиқотларнинг кўрсатишича, суқиладиган киришма атом r_k радиусининг асосий атом r_a — радиусига нисбати 0,59 дан кичик бўлиши керак.

Шундай қилиб, киришма $0 < r_k / r_a < 0,59$ бўлганда суқилиш эритмаси, $0,85 < r_k / r_a < 1,15$ бўлганда ўрин эгалаш эритмаси ҳосил қилади. $0,59 < r_k / r_a < 0,85$ соҳа эса умуман қаттиқ эритмалар ҳосил бўлиши учун мақбул эмас.

Ҳақиқий шароитда кристаллга киришма атом ташқи муҳитдан киради. Эрувчанликни миқдоран аниқлаганда кристалл ва ташқи фаза (муҳит) орасидаги термодинамик мувозанатни таҳлил қилиш лозим. Ташқи фаза сифатида ё буг (газ), ёки суёқ фазани қараш мумкин, чунки улар қаттиқ жисмларни легирлаш (уларга киришма киритиш) амалиётида кенг қўлланади.

Иккала ҳолда ҳам легирлаш жараёни мувозанатдан кам фарқ қиладиган шароитда олиб борилади.

6.2.5 Нуқтавий нуқсонлар аниқлайдиган хоссалар ва уларнинг ўзаро таъсири

Хусусий ва киришмавий нуқсонлар қаттиқ жисмларнинг амалда барча хоссалари таъсир кўрсатади. Заряд ташувчилар кристалл бўйича ҳаракат қилганида нуқтавий нуқсонлар билан ҳам тўқнашадилар.

Икки кетма-кет тўқнашиш орасида ўтган вақтни релаксация вақти (эркин югуриш вақти) дейилади. Бу вақт киришма ҳосил қилган нуқсоннинг табиати, ҳолати, зичлиги ва температурага боғлиқ бўлади (бу ҳақда ярим ўтказгичлар бобида батафсилроқ тўхталамиз).

Металларда хона температураси ва ундан юқорида заряд ташувчилар ҳаракатчанлигини кристалл панжараси атомлари тебранишлари билан тўқнашишлар аниқлайди, бу эса температура ортиши билан металлнинг электр қаршилиги ортиши-ни тақозо қилади.

Ярим ўтказгичларда нуқтавий нуқсонларнинг асосий аҳамияти тақиқланган зонада донор ва акцептор сатҳлар ҳосил қилиб, ярим ўтказгичнинг электр, фото электр ва бошқа хоссаларига таъсир қилишдир.

Диэлектрикларнинг хоссаларини асосан уларнинг ҳажмий тузилиш характеристикалари аниқлайди, уларда нуқсонларнинг аҳамияти нисбатан кичик.

Нуқсонларнинг аҳамияти ҳақидаги масалалар келгуси бекр неча бобларда қараб чиқилган.

Амалда барча нуқтасий нуқсонлар кристалларда белгисиз ҳолатда бўлади. Масалан, икки вакансия ўзаро белгисиз, ле- вакансия ҳосил қилиши мумкин. Иккинчи мисол яққа вакансияларнинг киришма атомлари билан ўзаро таъсиридир. Кристалларда нуқсонларро ўзаро таъсирлар сони жуда катта. Бил бир ва- часинигина кўрсатиб ўтамиз.

Икки қарама-қарши ишорали киришма ионлари жонлар жуфтни ҳосил қилиши мумкин.

Жуфтни ташкил қилган ионлар яқин масофаларда тургани туфайли улар орасида электрон ва ковакнинг белгисиз таъсири юз бериб, ковак йўқолиши мумкин. Бу жараёни киришмалар аро рекомбинация дейилади.

Кристалларда янада мураккаб нуқсонлар таркибига ки- ришмавий атомлар кириши мумкин.

Бундай мураккаб (бирлашма) нуқсонлар қаттиқ жисмлар- нинг кўп физик хоссаларига таъсир қилади. Масалан, улар за- ряд ташувчилар ҳаракатчанлигига, қаттиқ жисмлар исоқлик ўтказувчанлигига, уларнинг механик хоссаларига, киришмалар диффузиясига ва б.га муҳим таъсир қилади.

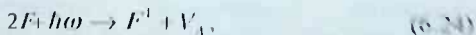
Ярим ўтказгичларда A — марказлар яримўтказгичда эриган кислород атомининг вакансия билан ўзаро таъсири маҳсули бўлади, ионлар кристалларида F — марказлар электронни ту- тиб олган анион вакансияларидан иборат.

Улар ишқорий металллар галогенидларида рангини белги- лайди. F — марказлар ютадиган ултрабинафша нурлар, тўлқин узунликлари қуйидагича:

Кристалл	NaCl	NaBr	KCl	KBr	KI
λ , нм	465	540	663	630	685

Булардан ташқари, ранглаш марказлари деб аталмиш му- раккаб нуқсонлар бирлашмалари ҳам мавжуд. Ундай марказ- ларни F , M , R ҳарфлари билан белгиланади.

F — марказ ёруғлик таъсирида иккита F — марказдан ташкил топади:



бунда V_A — анион вакансияси.

M — марказ ҳар бири биттадан электронни тутиб олган икки қўшни анион вакансиялардан иборат.

R — марказ ҳар бири биттадан электронни тутиб олган учта қўшни анион вакансияларидан ташкилланган.

Бу ранглаш марказларидан ташқари, мусбат ковак воситасида боғланган икки қўшни манфий ионлардан (масалан, хлор) таркибланаган V_k — марказ, хлорнинг ковак воситасида боғланган тугун ва тугунлар оралигидаги ионларидан иборат H — марказ мавжуд бўлишлиги аниқланган.

Ионлар кристалли ўтказувчанлик зонасидаги эркин электрон ва панжара қутбланиши бирлашмаси полярон дейилади-ган нуқсонлар хилини юзага келтиради.

Поляронлар бошқа нуқсонларга нисбатан юқори ҳаракатчанликка эга.

Электронга бериладиган ёруғлик ёки иссиқлик энергияси унинг ўтказувчанлик зонасига ўтиб олиши старти бўлмаганда, у шу зона яқинидаги ҳолатларга ўтиши мумкин, бу ўтишда ҳосил бўлган ковак билан электрон боғланган ҳолатда қолади. Бу электрон ва унга боғланган ковак жуфтини экситон дейилади (6.5- чизма).

Агар электрон ва ковак бир ионда бўлса, бу жуфтни Френкел экситони дейилади.

Экситонлар турли атомларга тегишли уйғотилган электрон ва ковакдан ташкилланган бўлса, уни Ванье — Мотт экситони дейилади.

Френкел экситони радиуси кичик, Ванье — Мотт экситониники катта. Экситон кристалл ичида ҳаракатлана олади, аммо токка ҳисса қўша олмайди, чунки электр жиҳатдан нейтралдир.

Экситон ҳосил қилиш учун, масалан, ёруғлик энергияси сарфланадию, аммо электр ўтказувчанлик ўзгармайди.



6.5-чизма. Экситоннинг ҳосил булиши.

6.2.6. Радиацион нуқсонлар

Юқори энергияли нурланишлар таъсирида қаттиқ жисмларда ҳосил бўладиган нуқсонларни радиацион нуқсонлар дейилади. Бундай нурланишлар — қаттиқ рентген нурланиши, γ — нурланиш, юқори энергияли электронлар, нейтронлар оқимидир.

Радиацион нуқсонлар назариясида бирламчи нуқсон Френкел жуфти бўлади деб ҳисобланади, кейинчалик бошқа иккиламчи нуқсонлар юзага келади. Агар атомни тугундан уриб чиқариш учун керак энергия E_d — бўлса, атомга нурланиш томонидан бериладиган E_A энергия E_d дан катта бўлса, атом, албатта тугундан чиқиб кетади, агарда бу атомда E_d дан ортиқ энергия қолса, у бошқа атомни уриб чиқаради ва ҳ.к.

Бироқ, радиацион нуқсон ҳосил қилишнинг бўсағавийдан пастроқ энергияга тегишли механизмлари бор. Бу механизмларнинг моҳияти шундаки, аввал кристаллнинг электронлари системачаси уйғотилади, энергия кристалл атомларига узатилади ва бирламчи радиацион нуқсонлар ҳосил бўлади. Бу уйғотиш кристаллнинг рентген квантлари, паст энергияли электронлар ва ҳатто ултрабинафша фотонлар билан нурлаш йўли билан амалга оширилади.

Бўсага ости нуқсонлар ҳосил бўлиши қуйидаги босқичлардан иборат:

1. Квантнинг ютилиши ва экситон ҳосил бўлиши;
2. Экситоннинг икки ионда (масалан, ишқорий — галоген кристаллда галогеннинг икки ионда) жойланиши, яъни квазимолекула ҳосил бўлиши;
3. Кулон итаришиш оқибатида квазимолекуланинг тугунлараро атом ва вакансияга парчланиши.

Радиацион нуқсонлар ҳосил бўлишининг бошқа йўллари ҳам мавжуд (плазмонлар механизми, ионизацион механизм ва бошқалар.).

Радиацион нуқсонлар, одатда, катта кинетик энергияга эга, ва шунинг учун улар кристалларда жуда ҳаракатчан бўлади. Радиацион нуқсонларнинг ўзаро ва бошқа радиацион бўлмаган нуқсонлар билан учрашуви эҳтимоллиги катта. Бу ҳолларда юз берадиган таъсирлашиш оқибатида нуқсонларнинг бирлашмалари ва ҳатто йирик уюмлари ҳосил бўлади.

Кристалл атомларининг ўз тугунларидан γ — квантлар таъсирида жилиб кетиш эҳтимоли кичик. Лекин γ — нурланиш

фотоэффект, Комптон эффекти, электронлар ва позитронлар жуфтлари туғилиши оқибатида вужудга келади.

Нейтронлар оқими моддага тушганда унинг бир қисми ютилиб, нуқсонлар пайдо қилади.

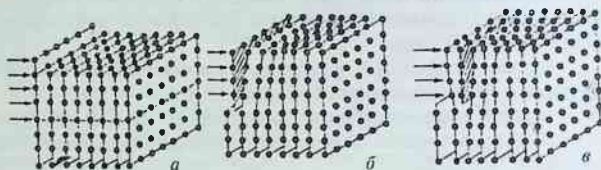
Кристалл атомларнинг ўз тугунларидан γ — квантлар таъсирида жиблиб кетиши эҳтимоли кичик. Лекин, γ — нурланиш фотоэффект, комптон эффект, электронлар ва позитронлар жуфтлари туғилиши оқибатида вужудга келади.

Кейинги даврда моддашунослик соҳасида бир вақтда қаттиқ жисмда мавжуд бўлган (киритилган) турли киришмалар бир-бири билан таъсирлашиши оқибатида модданинг айрим физик хоссалари жиддий ўзгариши мумкинлиги ва бу ўзгаришлардан амалда самарали фойдаланиш мумкинлиги аниқланмоқда.

6.3. Қаттиқ жисмларда чизигий нуқсонлар

Нуқсонларни ўлчамлар жиҳатидан синфларга ажратганда бир ўлчовли (чизигий) нуқсонлар айтиб ўтилган эди, бу нуқсонларнинг ўлчамлари икки йўналишда жуда кичик ($<a$) ва учинчи йўналишда ҳар қанча узун бўлиши мумкин. Бундай нуқсонларни **дислокациялар дейилади.**

Дислокациялар ҳосил бўлишини қарайлик. Кристаллнинг бир қисмига ташқи куч таъсир қилаётган бўлсин (6.6а- чизма).



6.6-чизма. Дислокация ҳосил бўлишининг кетма-кет bosқичлари: а) кристаллга силжитиш кучи қўйилиши; б) атомлар текисликларни букилиши; в) экстратекислик ҳосил бўлиши.

Кучнинг қандай бўлишига қараб кристалл эластик ёки пластик деформацияланади. Иккинчи ҳолда таъсир этувчи кучнинг бирор бўсағавий қийматига — силжиш кучланишига эришилганда сирпаниш вужудга келади. 6.6 а- чизмада узун чизик билан қандайдир фаразий текислик (сирпаниш текисли-

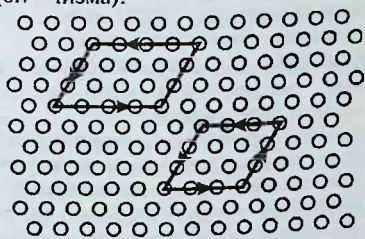
ги) тасвирланган, атомлар текисликлари унинг юқорисида ўннга силжийди, унинг пастидаги кристалл қисми эса қўзғалмайди.

Кристаллографик (атомлар) текислигининг деформацияланувчи қисми (ярим текислик) ўннга бирор масофага силжийди. (6.6 б- чизма) ва кейинги атомлар ярим текислигини деформациялайди.

Биринчи яримтекислик куч таъсири ортганда оқибатда кейинги юқориги ярим текислик устига тушади, пастки яримтекислигидан узиб қўяди (6.6 в- чизма). Узилган яримтекислик «ортикча», озгина деформацияланган иккита оддий (атомлар) текисликлари орасига «киритилган» (қистирилган) бўлиб қолади.

Янада каттароқ ташқи силжитиш кучланиши мавжуд бўлса, «ортикча» экстратекислик ўз навбатида келгусини жилдириб, унинг ўрнини эгаллайди, бу жараён токи намунанинг юқориги қисми пастки қисмига нисбатан \vec{b} Бюргерс вектори қадар силжимагунча давом этади (6.7- чизма).

Шундай қилиб, дислокация ёки дислокация чизиги деб кристаллнинг силжиган соҳасини силжимаган соҳасидан ажратиб турувчи чизикни айтилади. Бюргерс вектори \vec{b} кристалл панжарасида атомларнинг силжиш катталигини ва йўналишини аниқлайди.



6.7- чизма. Дислокация контури ва Бюргерс вектори.

Бюргерс вектори қиймати $|\vec{b}| = b$ дислокация ўлчови бўлади.

Ушбу эскартмаларни билиш зарур:

1. Дислокация чизигидан йироқда кристалл идеал кристаллдан фарқ қилмайди.

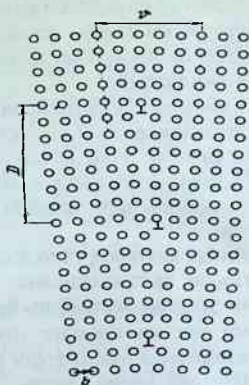
2. Бу чизик яқинида атомлар идеал кристалл тугунларига нисбатан анча силжиган бўлади.

3. Нолга тенг бўлмаган Бюргерс вектори мавжуд.

4. Бюргерс вектори дислокация чизигига тик бўлади, бундай дислокацияни чегаравий дислокация дейилади.

Чегаравий дислокациядан ташқи винтсимоон дислокациялар ҳам мавжуд (6.8- чизма). Дислокация чизиги Бюргерс векторига параллел.

Ҳақиқий қаттиқ жисмларда дислокациялар зичлиги катталиги d киритилади ва у 1 см^2 сиртдаги дислокациялар сонини билдиради. Дислокациялар зичлигини аниқлашнинг энг кўп тарқалган усули кристалл сиртини кимёвий едиришдир. Кристалл сиртига чиқувчи дислокациялар соҳасида едириш чуқурчалари пайдо бўлади. Уларни микроскоп ёрдамида санаш мумкин. Дислокациялар зичлиги d нолдан то катта сонга қадар қийматларга эга бўла олади. Масалан, дислокациясиз ярим ўтказгич монокристалларда $d=0$, металлларда у 10^{12} см^{-2} гача етиши мумкин.



6.8- чизма. Кристаллда фаза ичидаги чегаранинг ҳосил бўлиши.

Биз айтиб ўтган дислокацияларнинг икки туридан бошқа яна мураккаброқ дислокациялар мавжуд бўлиши мумкин. Дислокацияларнинг хусусиятларидан бири — уларнинг ўзаро ва бошқа нуқсонлар билан таъсирлашишидир. Дислокацион реакциялар оқибатида янги дислокациялар ҳосил бўлиши ёки дислокациялар бирлашиши мумкин: \vec{b}_1 ли дислокация иккита \vec{b}_2 ва \vec{b}_3 Бюргерс векторли дислокацияга ажралиши ва аксинча реакциялар бўлиши мумкин:

$$\vec{b}_1 \begin{matrix} \rightarrow \\ \leftarrow \end{matrix} \vec{b}_2 + \vec{b}_3 \quad (6.25)$$

Дислокацион реакцияларнинг маҳсули нуқсонларнинг бошқа турлари бўлиши эҳтимоллиги мавжуд. Масалан, икки дислокация учрашиб вакансия ҳосил қила олади. Қаттиқ жис-

мдаги киришмалар билан дислокацияларнинг ўзаро таъсири эластик ва электр йўсинда юз бериши мумкин.

Кристаллда чўзувчи кучланиш ҳосил қиладиган киришма атом дислокация атрофидаги қисилган соҳа томон кўчади, қисувчи кучланиш ҳосил қиладиган атом эса, — чўзилган соҳа томон кўчади. Бундай ўзаро таъсир чегаравий дислокацияларга хосдир. Дислокацияларнинг электр ўзаро таъсирлашишида унинг энергиясини кулон потенциали аниқлайди ва шунинг учун $1/r$ га пропорционал.

Металл кристалларда кўп миқдордаги эркин электронлар дислокациялар ёки нуқтавий нуқсон майдонини экранлайди, шунинг учун металлларда бу ўзаро таъсир муҳим эмас. Ярим ўтказгичлар ва ионлар кристалларида экстра текислик пастидидаги атомларнинг узилган кимёвий боғланишлари электр потенциал ҳосил қилади, улар акцепторлик (электронни қабул қилиш) хоссасига эга. Шунинг учун n — тур ярим ўтказгичларда бу боғланишлар ўтказувчанлик электронларини тутиб олади ва дислокацияларга манфий заряд беради, у эса мусбат ионларни (ёки ковакларни) тортувчи электр потенциал ҳосил қилади.

Ҳар қандай механик ишлов ҳам макро кучланишдир ва бинобарин, дислокациялар ҳосил қилишга олиб келади.

Қаттиқ металлларда босим остида ишлов — чўзгилаш, болғалаш, сурғалаш — дислокациялар пайдо бўлишига сабаб бўлади. Юқори кучланиш жойларида дислокациялар вужудга келади, кейин улар кўпаяди. Бундай пластик деформациялардан ташқари, дислокациялар кристалларни кесиш, сайқаллаш жараёнлари оқибатида ҳам пайдо бўлади. Кристалланиш жараёнида температура градиентлари мавжуд бўлиши дислокациялар манбаи бўлиши мумкин. Кристалларни ўстириш жараёнида пайдо бўлган дислокациялар юқорида тавсифланганларидан фарқ қилади. Бирламчи ҳамиртуруш кристалл дислокациялари ўстирилган кристаллга мерос бўлиб ўтади (меросий дислокациялар). Кристалл бошқа моддадан ясалган таглик билан контактлашганда номослик дислокациялари намоеён бўлади. Бундай дислокациялар $A^{III}B^V$ — Ge, $A^{II}B^6$ — $A^{III}B^I$ ва ҳоказо каби яримўтказгич гетеротузилмаларни эпитақсия усулида ўстиришда катта ўрин тутлади.

Дислокацияларнинг қаттиқ жисм хоссаларига таъсири қандай?

Дислокациялар асосан қаттиқ жисмларнинг механик хос-сахарига, биринчи навбатда уларнинг мустаҳкамлик характе-ристикаларига таъсир кўрсатади. Ҳақиқий кристалларда дис-локациялар маҳкамланиши эффекти мавжуд. Бунинг бир неча механизмлари бор: ёт зарралар (киришмалар) билан маҳкамланиш; дислокацияларнинг «чирмашиши». Биринчи ме-ханизм фақат баъзи ҳолларда муҳим. Бу ҳолларнинг бири Кот-трел атмосфераларининг ҳосил бўлишидир, Ёт зарралар - асо-сий кристалланикидан бошқа моддаларнинг микроскопик ки-ришмалари эриган модда томонидан ушланади ва суюлмани со-вутиб қотирганда унда қолади. Бу зарралар асосий модда билан биргаликда қотишма ҳосил қилади.

Дислокацияларнинг чирмашиши равишида ҳам дислока-циялар бир-бирини тормозлайди. Энг муҳим масала дислока-цияларнинг заряд ташувчилар (электронлар ва ковалар) энер-гиялари спектрига киритадиган ўзгаришларидир. Олдин айт-ганимиздек, дислокация электронларни қабул қилувчи акцеп-тор вазифасини ўтайди. Бундай қарашда дислокациялар таъсири ковалент кристаллга киритилган киришма атомлар таъсирига ўхшайди. Бундай акцептор сатҳлар бир — бирига яқин бўлиб, ўзаро таъсирлашиб, дислокацион энергетик зона-ни вужудга келтиради. Дислокацияли яримўтказгичда элек-тронлар зичлигини ҳисоблашда электр нейтраллик шартида дислокациялар зарядини ҳам ҳисобга олиш керак бўлади. Яримўтказгичларда дислокациялар ҳаракатчан заряд ташувчи-ларни сочиб юбориш орқали уларнинг ҳаракатчанлигига таъсир қилади. Дислокациялар заряд ташувчиларнинг яшаш вақтига муҳим таъсир кўрсатади. Дислокациялар атрофидаги ҳажмий заряд номувозанатий электронларнинг ушланишига ҳалақит беради. Дислокация электронларнинг яхши ёпишиш марказлари бўлади. Барча қаттиқ жисмларда дислокациялар диффузия жараёнига таъсир кўрсатади.

6.4. Қаттиқ жисмларда ясси нуқсонлар

Энг муҳим ясси (икки ўлчовли) нуқсонлар — поликристалл доналарининг чегаралари, эгизаклар ва тахланиш нуқсонларидир.

Доналарнинг (кристаллитларининг) чегараларини кўрайлик. Умуман уларни фазалараро ва фазалар ичидаги чегаралар гу-руҳларига ажратилади. Фазолараро чегаралар мисоли кристалл-

нинг ташқи муҳитдан ажратувчи ёқлари, ўсаётган кристаллнинг суюлма билан чегараловчи сирт, метал қотишмаларда турли фазалар зарралари орасидаги чегаралар бўлади.

Фаза ичидаги чегаралар деганда кристаллларнинг бир ва ўша фазага мансуб ва шу кристалллар контактига бевосита туташувчи соҳаларни тушунилади. Чегара дислокацияларнинг алоҳида жойлашиши ҳолида ҳосил бўлади, бунда кристалл қисмлари қандайдир ϑ бурчак қадар бурилган бўлади: чизма текислигига тик бўлган атомлар текисликлари чизма текислигига тик ўққа нисбатан ϑ бурчакка бурилган бўлади. Чегара соҳасидаги дислокациялар ораллиғини D дейилса, Бюргерс вектори катталиги в эканлиги эсланса,

$$b/D = 2 \cdot \sin \frac{\theta}{2} \quad (6.26)$$

муносабатни олиш мумкин. Агар $\frac{\theta}{2} \ll 1$ бўлса, (6.26) ифода

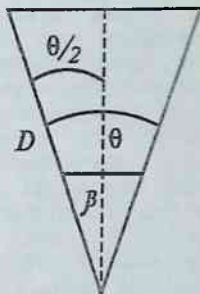
$$\theta = b/D \quad (6.27)$$

кўринишни олади. Бу муносабатни қаноатлантирадиган чегараларни кичик бурчакли, (6.26)ни қаноатлантирувчи чегараларни катта бурчакли чегаралар дейилади.

(6.27) ифода $\theta < 5^\circ$ бўлганда ба- жариледи. Доналар чегараларининг дислокацион табиати чегаранинг қалинлигини аниқлайди, у $(1+2)w$ чамасида бўлади (w -дислокация кенглиги), яъни чегара қалинлиги бир неча атомлараро масофадан ортиқ бўлмайди.

Кичик бурчакли чегаралар поликристаллларнинг айрим кристаллитларида ва монокристаллларда бўлиши мумкин. θ бурчаклар катта бўлган ($\theta > 5^\circ$) чегаралар ажратган кристалл қисмларини кристалликлар ёки доналар дейилади. Катта бурчакли чегараларга эга бўлган қаттиқ жисм албатта поликристалл бўлади.

Эгизаклар — катта бурчакли чегараларнинг хусусий ҳолидир. Эгизаклик чегараси кристаллнинг бири иккинчисининг

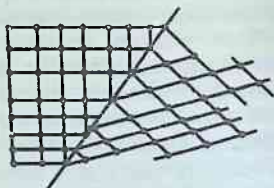


6.9-чизма. (6.26) ифодага доир чизма.

кўзгусимон тасвири бўлган икки соҳасини ажратиб турувчи чегарадир (6.10- чизма).

Эгизаклар кристаллар ўсишида, шунингдек механик, деформацион таъсир оқибатида вужудга келиши мумкин.

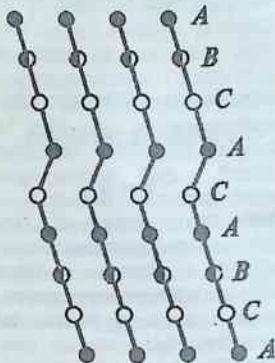
Тахланиш нуқсонлари кристалл панжарада атомларнинг идеал жойлашишининг бузилишидан иборат. Бундай нуқсонлар асосан металл кристалларда кузатилади.



6.10- чизма. Эгизакларга оид.

6.5. Қаттиқ жисмларда ҳажмий (макроскопик) нуқсонлар

Қаттиқ жисмларда ҳажмий нуқсонлар ўлчамлари барча уч фазовий йўналишда панжара даври a дан катта бўлган нуқсонлардир. Улар моҳиятан қаттиқ жисм тузилишининг макроскопик бузилишларидир. Ҳажмий нуқсонларга ёки жисмнинг бутун ҳажмини, ё унинг айрим қисмларини (уларни макроскопик ҳажмлар ҳисобланади) эгаллаган ва ҳажми $\gg a^3$ бўлган эластик кучланишлар мансуб. Дарзлар ва коваклар, қаттиқ жисм сиртидаги тирналишлар ва ҳажмда тўпланган киришма уюмлари ана шундай нуқсонлардир.



6.11- чизма. Тахланиш нуқсонлари.

Макронуқсонлар микро-нуқсонларнинг бирлашиши натижасида ҳосил бўлиши равшан кўриниб турипти. Биз олдин эластик кучланишлар дислокациялар ҳосил бўлишлиги манбаи эканлигини кўрдик. Энди бу кучланишларнинг вужудга келиши ва намоён бўлишига назар ташлайлик. Ҳар хил ишорали кучланишлар — чўзувчи ва қисувчи кучланишлар бўлади. Агар жисм мувозанатда бўлса, турли ишорали кучланишлар ўзаро мувозанатлашган. Қаттиқ жисмнинг бир қисмини узоқлаштириш бу мувозанатни бузади

ва жисм янги мувозанат ҳолатига интилади, бунда эластик кучланишлар қайта тақсимланади.

Макрокучланишлар кристалл панжарасининг атомлараро d масофаларнинг ўзгаришидан вужудга келади. Қаттиқ жисмларни олишда макрокучланишлар вужудга келишига температуранинг жисм ҳажмида бир хил бўлмаслиги катта ҳисса қўшади. Бундай макрокучланишларни термоэластик кучланишлар дейилади. Қаттиқ жисмда уни тайёрлаш ёки унга термомошлов беришдаги температура тақсимотини

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{c\rho} \Delta T \quad (6.28)$$

иссиқлик ўтказувчанлик тенгламасини ечиб топилади, (k - солиштирма иссиқлик ўтказувчанлик коэффиценти, c - жисмнинг иссиқлик сифими, ρ -намуна зичлиги).

Бу тенглама мураккаб, уни ечиш махсус адабиётда келтирилган. Биз бу жойда баъзи бир маълумот берамиз.

Температуранинг тўсатдан ўзгариши — иссиқлик зарбаси қаттиқ жисмда кенгайиш — қисилиш эластик тўлқинлари пайдо қилади. Агар температура вақт бўйича ўзгариб турса, албатта жисмнинг даврий “исиш-совиш” жараёни юз беради. Бу эса бузилишлар (нуқсонлар) жамғарилишига олиб келади. Бу эффектни материалнинг чарчашини дейишда.

Техникада кўп қатламли қаттиқ жисм тузилмалари муҳим ўрин тутди. Бу ҳолларда макрокучланишлар манбалари: таглик ва қатлам панжаралари доимийларининг фарқи, иссиқликдан кенгайиш коэффицентларининг тафовути бўлади. Жуда юпқа пардаларда сирт таранглик кучлари кучланишларининг кўшимча манбаи бўлади. Эластик кучланишларнинг бошқа манбалари ҳам уларни кейинги бобларда кўраемиз.

Дарзлар дислокацияларнинг қаттиқ жисм ичида кўчиши жараёнида тормозланиши натижаси сифатида қаралмоқда. Дарзнинг кенглиги уни ҳосил қилишда қатнашган дислокациялар миқдорига боғлиқ. Агар ундаги дислокациялар зичлиги n бўлса, дарзн $n\vec{b}$ Бюргерс векторли битта катта дислокация деб қараса ҳам бўлади. Дарз ҳосил бўлишининг яна бир эҳтимолий йўли турли ишорали дислокациялар тўпланган ик-

ки кесишувчи текисликнинг ўзаро таъсиридир. Дарз пайдо бўлгандан кейин унинг тақдири қандай бўлади?

Дарзнинг узунлигини l ҳарфи билан, унинг ён чегарасидаги критик кучланишни σ орқали, Юнг модулини E орқали, бузиш солиштирма ишини γ орқали белгиласак, анча узун ҳисоблашлардан

$$\sigma = \sqrt{2E\gamma / \pi l} \quad (6.29)$$

Гриффицс қонунини келтириб чиқарилади. Бу ифодадан намунани (буюмни) бузмайдиган дарзнинг l критик узунлигини аниқлаш мумкин. Агар мазкур моддага ундан кўра мустақкамроқ модданинг макрозарралари киритилса, кенгаётган дарз шу киритмага тақалади ва тўхтаб қолади. Шу йўл билан кўп миқдорда композицион материаллар олинган.

Энди қаттиқ жисмдаги коваклар (коваклар) ҳақида тўхталамиз. Коваклар қаттиқ жисмда атомлар эгалламаган бўш жойлардан иборат. Уларнинг бир томони сиртга чиққан бўлса, бундай ковакларни очиқ коваклар дейилади, агар ковак кристалл ҳажмида жойлашган ва ташқи муҳит билан туташган бўлмаса, уни ёпиқ ковак дейилади.

Коваклар ҳосил бўлишининг асосий манбаларини қарайлик.

1. Коваклар ҳосил бўлишининг диффузион механизми.

Ковак кўп сонли вакансиялар йиғилиши натижаси сифатида қаралади. Жисм сиртида эгриланган (қабариқ ёки ботиқ) жойларда вакансиялар кўп тўпланади. Қабариқ жойда сиртнинг катталиги ўзи мувозанатсиз, ортиқча, система уни кайтайтиришга интилгани туфайли бунга ёндош ҳажмининг кичрайтиши орқали эришилади. Умумий ҳажм ўзгармагани ҳолда агар бир қисм вакансияларни атомлар эгалласа ҳажм муайян миқдорда камаяди. Шунинг учун қабариқ сирт устида вакансиялар кам бўлади. Худди шундай мулоҳаза ботиқ сирт остида вакансиялар зичлиги ортади деган хулосага келтиради. Шундай қилиб, ковакнинг ташқи сиртида вакансиялар кам, ички сиртида эса вакансиялар ортиқча бўлади. Демак, ковак вакансияларнинг каттакон уймасидир. Вакансиялар ковак ҳосил бўлаётган жойга диффузия йўли билан кучиб боради. Шунинг учун ковак ҳосил бўлишининг бу механизмини диффузион механизм деб аталган.

2. Термоишлов жараёнида коваклар ҳосил бўлиши.

Тажрибадан маълумки, металл намуналар термоишлов жараёнида деформацияланади ва шишади, уларда коваклар ҳосил бўлади, термоишлов кўп марта такрорланса - дарзлар пайдо бўлади. Тадқиқотлар куйидаги қонуниятларни аниқлайди:

1) Термоишлов сони ортиши билан коваклар миқдори ва ўлчами ортиб боради.

2) Коваклар намуна кесими бўйича нотекис тақсимланади: уларнинг миқдори марказдан четга томон бир текис камайиб боради.

2-3 мм қалинликдаги цилиндрик намунанинг гардишида коваклар бўлмайди. Бу ходисалар шундай тушунтирилади.

$T_{\text{суял}}$ суюлиш температурасига яқин T температурада олинган намунада вакансияларнинг катта зичлиги вужудга келади. Кескин совутганда кристаллда улар «яхлайди». Бу жараёни чиниқиш дейилади. Кейинги қиздиришда ортиқча вакансиялар ўта тўйинган эритмадан тушиб қолиши керак. Аммо бу тушиб қоладиган вакансиялар етарлича ҳаракатчан ва қайси бир жойда (пайновда) уюшишга улгуради. Бундай пайновлар хизматини доналараро чегаралар, дислокациялар бажаради. Температуранинг кўп марта ўзгартириш чиниққан вакансиялар миқдорини ошириб боради, бу эса коваклар сони ва ўлчамларини ўстиради.

3. Қаттиқ жисмлар контакти соҳасида коваклар ҳосил бўлиши. Турли табиатли A ва B икки қаттиқ жисм контактини қарайлик. Қиздирилганда A атомларнинг B — панжарага, B атомларнинг A — панжарага ўзаро қарама-қарши диффузия вужудга келади. Диффузия коэффицентлари тенг бўлмаганлигидан ($D_{A \rightarrow B} \neq D_{B \rightarrow A}$) контакт чегарасидан ўнг ва чап томонда диффузияланган атомлар миқдори тенг бўлмайди, масалан, $D_{A \rightarrow B} > D_{B \rightarrow A}$ бўлса, у ҳолда $N_{A \rightarrow B} > N_{B \rightarrow A}$ бўлади. Оқибатда A кристаллда эгалланмаган вакансиялар, B кристаллда ортиқча атомлар пайдо бўлади. Демак, A кристаллда вакансиялар манбаи, B кристаллда атомлар манбаи ишлаб туради. Аммо улар чексиз ортиб бора олмайди, чунки чегаравий дислокациялар A томонда вакансияларни, B томонда ортиқча атомларни ютиб, қарама-қарши йўналишларда ҳаракат қилади. A кристаллда улар аста-секин кристаллдан чиқади, B кристаллда эса улар аста-секин пайдо

бўлади. Шундай қилиб контакт соҳасида икки эффект: бўшлиқ ўсиши (Френкел эффекти) ва атомлар текислигининг кучиб ўтиши (Киркендал эффекти) юз беради.

4. Учувчан таркибловчили қаттиқ жисмларда ковакдорлик

Кўп таркибловчили қаттиқ жисмларда учувчан таркибловчининг бугланиши ортиқча вакансиялар манбаи бўлади. Ярим ўтказгич қаттиқ жисмлардан галлий арсениди GaAs мисол бўлади, чунки ундаги As маргумуш анча учувчандир. Қаттиқ жисм сиртидан бугланган атомлар ўрнида вакансиялар пайдо бўлади, уларни ичкаридаги атомлар келиб тўлдиради. Улар ҳам яна бугланади, вакансиялар яна тўлдирилади ва ҳ.к. Натижада намуна ҳажми ортиқча миқдордаги вакансиялар билан тўйинади. Уларнинг баъзилари сиртга ва дислокацияларга кетади, лекин уларнинг бирор миқдори йигилиб коваклар ҳосил қилади.

Бошқа ҳажмий нуқсонлардан кристаллнинг мозаикалиги ва газ пуфакларини айтиб ўтамиз. Ҳажмий нуқсонлар қаттиқ жисмлар физик хоссаларига муҳим таъсир кўрсатади. Буни қисман айрим ҳажмий нуқсонлар тўғрисида тўхталганда гапириб ўтдик.

Макронуқсонларга эга бўлган жисмларда диффузияни тадқиқлаганда икки омилга алоҳида эътибор бериш керак. **Биринчидан**, диффузия коэффиценти анизотроп бўлади, у албатта диффузия оқимини аниқлашда муҳим. **Иккинчидан**, дарзлар тури бўйлаб атомларнинг диффузион ҳаракатчанлиги муҳим даражада ортиқ бўлади.

Коваклар ҳажмий диффузия фронтини камайтиради, бу эса диффузион оқимни камайтиради. Лекин, коваклар билан боғлиқ сиртий диффузия қаттиқ жисм орқали диффузияни орттиради.

Макро нуқсонли қаттиқ жисмларнинг механик хоссалари ҳам нуқсонлар табиати, зичлиги ва бошқа характеристикаларига боғлиқ, макронуқсонлар қаттиқ жисмнинг эластиклик модулларига муҳим таъсир кўрсатади. Масалан, коваклар nisбий ҳажми $K = V'_{ков} / (V_{ков} + V_c)$, бунда V_c — коваксиз қатлам ҳажми, $V_{ков}$ — коваклар ҳажми. Ковакли ва коваксиз жисмлар силжиш модули (G^* ва G) ва ҳар тарафлама қисилиш модули (H^* ва H) ифодаларига киради:

$$G/G^* = 1 - 5K(3H + 4G)/(9H + 8G).$$

$$\frac{1}{H^*} = \frac{1}{H(1-K)} + \frac{3}{4G} \cdot \frac{K}{1-K}. \quad (6.30)$$

Бу ифодалар тажрибаларда тасдиқланган.

Ковакли жисмда эластик тўлқиннинг тарқалиши эластиклик кучланишлари (босим) ва температура тебранишлари вужудга келиши билан боғлиқ. Бундай тўлқин, шунингдек, ковакнинг қаттиқ фаза билан чегарасида фазавий мувозанат шартларнинг бузилишидан ҳам пайдо бўлади. Паст товуш такрорийликларда бир ўтиш даврида вакансия панжарадан ковакка ва тескарича ўтишга улгуради ва эластиклик модули бир фазали системаникидан кам бўлади, товуш тезлиги v_0 кичик бўлади. Катта такрорийликларда вакансия панжарага ва тескарича ўтишга улгура олмайди, эластиклик модули такрорийликка боғлиқмас, товуш тезлиги v_0 каттароқ бўлади.

6.6. Нуқсонлар диффузияси

Диффузия жараёни системанинг атомлар зичлигини тенглаштиришга ўз-ўзидан интилишидан иборат. Атомлар кам бўлган йўналишда кўчади. Системада атомлар кўчиши тартибсиз дайдиш оқибатида юзага келади. Шу йўсинда системадан бир вақтда тартибсиз — иссиқлик ҳаракати ва йўналган — дрейф ҳаракати мавжуд бўлади. Кейинги ҳаракат системада қандайдир куч таъсирида содир бўлади. Бу куч вазифасини зичлик, температура, электр потенциал ёки умумий ҳолда кинемвий потенциал градиентлари бажаради.

Тартибсиз иссиқлик ҳаракатининг ўзи диффузион оқим ҳосил қилмайди. Қаттиқ жисмдаги иссиқлик тебранишлари диффузияга олиб келмайди.

Диффузия жараёнини миқдоран баҳолаш учун зарур бўлган тензиамаларни шакллантирайлик.

Аввало диффузион оқим зичлиги тушунчаси I ни киритамиз.

Диффузион оқим жисмнинг бирлик сиртидан бирлик вақтда диффузиялаб ўтган молда миқдори бўлиб, y

$$I = dQ/Sdt \quad (6.31)$$

кўринишда ифодаланади, бунда dQ – жисмининг S – сирти орқали dt - вақтда ўтган модда миқдори кесим юзига, модда зичлиги градиенти $\frac{\partial c}{\partial x}$ га, dt вақтга пропорционал катталик:

$$dQ = -DS \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) dt. \quad (6.32)$$

Бундаги D -диффузия коэффициентини. (6.32) ни (6.31) га қўйсак,

$$I = -D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right). \quad (6.33)$$

Фик биринчи қонуни ифодаси ҳосил бўлади. Уч ўлчовли ҳолда у

$$\bar{I} = -D \nabla c \quad (6.34)$$

кўринишда бўлади.

Диффузияланувчи модда – диффузантининг вақт ва фазода ўзгаришини Фикнинг 2-қонуни ифодалайди, уни биринчи қонун ва узлуксизлик тенгласидан $\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial I}{\partial x} = 0$ келтириб чиқарилади:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (6.35)$$

(6.35) тенгламани ечиб, зичлик $c(x,t)$ ёки уч ўлчовли ҳолда $c(x,y,z,t)$ тақсимооти аниқланади.

Кўпчилик ҳолларда бу ечимлар бир ўлчовли ҳолда

$$c \sim t^{-1/2} \exp(0,25 x^2 / Dt) \quad (6.36)$$

кўрсаткичли функция кўринишида ёки бошқа

$$c \sim \left[1 - \operatorname{erf}(0,5x / \sqrt{Dt}) \right] \quad (6.37)$$

функция орқали ифодаланади.

Бу ечимларда

$$L_D = \sqrt{Dt} \quad (6.38)$$

катталиқ узунлик ўлчамига эга, уни диффузион узунлик дейилади. Тадқиқотлар диффузия коэффициентининг температурага боғланиши учун

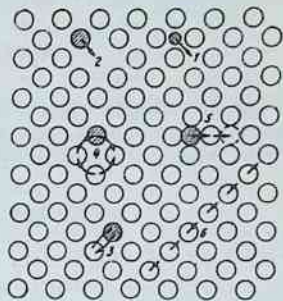
$$D = D_0 \exp(-W/kT) \quad (6.39)$$

ифодани беради.

Бунда W — диффузион энергетик тўсиқ баландлиги.

Биз иккита энг қизиқарли механизм — тугунлараро ва вакансиялар бўйлаб диффузияланиш механизмларини кўриб чиқамиз. Улар 6.12-чизмада 1 ва 2 сонлари билан белгиланган.

(6.39) ифодага биноан диффузияланувчи зарра бир мувозанатий вазиятдан иккинчисига ўтиш учун энергетик W тўсиқдан ошиб ўтиши керак. Зарраларнинг бу сакрашини газда атомларнинг тўқнашишига ўхшатилса ва кинетик назариянинг молекулалар диффузияси учун



6.12-чизма. Кристалл панжарасида киришмалар диффузиясининг имконий механизмлари (киришма атом-чиқиқланган доира):

1. Содда, тугунлараро; 2. Вакансион;
3. Содда, алмашиниш; 4. Циклик алмашиниш; 5. Сикиб чиқариш, тугунлараро; 6. Краудион диффузия.

$$D = \bar{\lambda} \cdot \bar{v} / 3 \quad (6.40)$$

ифодаси ($\bar{\lambda}$ — газда зарранинг эркин югуриши ўртача узунлиги, \bar{v} — ўртача иссиқлик тезлиги) қўлланса бўлади. Агар l — диффузион узунлик тартибидаги катталиқ $\bar{\lambda}$ — ўрнига олинса τ — зарранинг мувозанатий ҳолатда бўлиш вақти бўлса, унда диффузион сакраш тезлиги $\bar{v} = l / \tau$ бўлади. Энди $1/3$ кўпайтувчи ўрнига кристалл панжарада атомлар жойлашиши геометриясини ҳисобга олувчи α — коэффициент олинса, қаттиқ жисм учун (6.40) ўрнига

$$D = \alpha l^2 / \tau \quad (6.41)$$

деб ёзиш мумкин.

Суқилиш қаттиқ эритмаларида атомлар диффузияси (Верт ва Зинер) $(l/\tau)=v$ диффузион сакрацлар такрорийлиги кири-тилса,

$$D = \alpha l^2 / \tau = \alpha v^2 \tau \quad (6.42)$$

v катталикини ўтишлар P эҳтимолиги орқали

$$v = v_0 g^P \quad (6.43)$$

муносабат ёрдамида ифодалаш мумкин, бунда v_0 — суқулган атомнинг тебранишлар такрорийлиги, g — координацион сон-га тенг сакрацлар имконий йўналишлари сони

$$v_0 = \left[\Delta E_m / (2Ml^2) \right]^{1/2} \quad (6.44)$$

ифода назарий йўл билан келтириб чиқарилган, бундаги ΔE_m — диффузия (миграция)ни активлаш энергияси, M — диффузияланаётган модда массаси. Бир тугунлар ора-лигидан иккинчисига ўтиш эҳтимолиги (доний босимда) эркин энергиянинг ΔF ўзгариши орқали

$$W = \exp[-\Delta F/kT] \quad (6.45)$$

ифодаланади, бундаги

$$\Delta F = \Delta E_m - T\Delta S_m \quad (6.46)$$

Юқоридаги ифодалардан суқилиш қаттиқ эритмасидаги киришма атомлар диффузия коэффициентини аниқланади:

$$D = D_0 \exp[-\Delta E_m/kT], \quad (6.47)$$

бунда

$$D_0 = \alpha g l^2 v_0 \exp(\Delta S_m/k). \quad (6.48)$$

Верт ва Зинер назариясида

$$\Delta S_m = \Delta E_m \frac{\partial}{\partial T} (G'/G'_0) \quad (6.49)$$

муносабат олдингиким, у диффузия энтропиясини баҳолаш ва D_0 ни аниқлаш имконини берали. Бу ифодадаги G — силжиш модули, G_0^* — музлақ пол (0K) даги силжиш модули. Аммо бунда ΔE_m^* активлаш энергияси ва силжиш модулининг температурага боғланиши маълум бўлиши керак.

Ўрин эгаллаш қаттиқ эритмаларда атомлар диффузияси назариясида ҳам $D = a^2 \nu$ т дастлабки тенглама бўлиб, лекин диффузия параметрлар бошқача физик маънога эга. Дарвоқе, ν такрорийлик мазкур эритмаларда яна диффузияланаётган атом қўшни вакансия ҳосил бўлиши эҳтимоллигига ҳам боғлиқ:

$$\nu = g\nu_0 \exp\left[-\frac{\Delta F}{kT}\right] \exp\left[-\frac{\Delta F_1}{kT}\right] \quad (6.50)$$

Бу ерда ν_0 — кристалл панжараси тугунидаги атомнинг тебранишлар такрорийлиги, ΔF — ўша (6.46) кўринишга эга. ν , ΔF ва ΔF_1 ларни (6.42) ифодага қўйсак, (6.47) ва (6.48) ифодаларни ҳосил қиламиз, аммо уларда

$$\Delta G_m = \Delta E_m^* + \Delta E_f; \quad \Delta S_m = \Delta S_m^* + \Delta S_f. \quad (6.51)$$

Чизиқчали катталиклар сакраб ўтишга тегишлидир. Демак, диффузия жараёни миграция (кўчиш) ΔE_m — энергияси орқали аниқланади, аммо у тугунлараро диффузия ва тугунлар бўйлаб диффузия ҳолларида фарқли бўлади. Бу энергия нейтрал атомлар ёки ионлар диффузияланиши ҳолларида ҳар хил бўлади.

Макронуксонли қаттиқ жисмларда диффузия. Бу ҳолда ҳолисани икки хусусиятини ҳисобга олиш зарур. **Биринчидан**, диффузия коэффициенти анизотроп катталик. Шунини учун поликристаллнинг ихтиёрий ҳар хил йўналган доналарида зичлик градиенти йўналишидаги диффузион оқимлар турли бўлади. **Иккинчидан**, дарзларнинг ривожланган тури бўйлаб атомлар диффузион ҳаракатчанлиги ортиши муҳим, буни оқибатида макроскопик диффузион оқим ортади. Макронуксонли қаттиқ жисмда D^* диффузия коэффициенти нуқсонсиз кристаллда D диффузия коэффициенти билан боғлиқ. Буни аниқлаш учун киришмалар зичлигининг

$$c = \left[0,5c_0 / \sqrt{\pi D t}\right] \exp\left[-x^2 / 4Dt\right] \quad (6.52)$$

ифодасидан фойдаланамиз. Бунда D ни D^* га алмаштириб, сўнг $s = \bar{s}$ деб олинса, изланаётган D^* диффузия коэффициентини ифодаси ҳосил бўлади:

$$D^* = \frac{x^2}{4t} \left[\frac{x^{4/3} D_0^{1/3}}{2(\delta D_S / 3)^{2/3} t^{1/3}} \right] - \ln \left[\frac{6D_0^{1/6} (\delta D_S / 3)^{2/3} t^{5/6} (\pi \pi^* t)^{1/2}}{Lx^{4/3}} \right] \quad (6.53)$$

Масалан, $D_0 \cong 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$, $x \cong 10^{-3} \text{ м}$, $L \cong 10^{-4} \text{ м}$, $\delta D_S \cong 10^{-17} \text{ м}^3/\text{с}$ бўлса, $D^*/D_0 \cong 10 + 10^2$. Бу $L \cong 10^{-4} \text{ м}$ бўлганида макронуксонсиз

кристаллда диффузия коэффициенти макронуксонли кристаллдан унларча марта ортиқ булар экан. Ҳисоблар ва таҳлилнинг тасдиқлашича, йирик коваклар диффузияни сусайтиради. Демак, майда ковакларнинг йирик ковакларга бирлашиши қаттиқ жисмдаги диффузияни пасайтиради.

Саволлар ва масалалар

1. Тугунлар сони 10^{22} см^{-3} , Шотки нуқсони ҳосил бўлиши энергияси 1,5 эВ бўлса, қайси температурада нуқсонлар (вакансиялар) зичлиги 10^6 см^{-3} бўлади?

2. Тугунларнинг умумий сони ва тугунлар оралиги сони тенг, $T=300\text{К}$, Френкел нуқсони ҳосил бўлиши энергияси 2 эВ бўлганда бундай нуқсонлар сони қанча?

3. Бор ва Фосфор элементлари кремнийда қандай қаттиқ эритма ҳосил қилади? (6.2-жадвалдан фойдаланинг).

4. 141-бетдаги маълумотдан фойдаланиб, ишқорий металллар галогенидларига F -марказлар қандай ранг беришини аниқланг.

5. Нуқсоннинг таърифи қандай?

6. Нуқсонларга боглиқ электронлар энергетик ҳолатлари кристаллнинг зоналаридаги ҳолатлардан қанақа фарқ қилади?

7. Нуқсонларнинг ўлчамлар бўйича синфланиши қанақа?

8. Экситонлар, поляронлар, электрон — ковак жуфтларининг моҳияти нимада?

9. Вакансияларнинг қандай хилларини биласиз, улар орасида қандай фарқлар бор?
10. F — марказлар нима?
11. Радиацион нуқсонлар қанақа?
12. Бюргерс контури ва вектори нима?
13. Дислокациялар нима? Уларнинг қандай турлари бор?
14. Яримўтказгичларда электронлар энергетик спектрига дислокациялар қандай ўзгаришлар киритади?
15. Кристалларда қандай ясси нуқсонлар бор ?
16. Қаттиқ жисмларда қандай ҳажмий нуқсонлар бор ?
17. Қаттиқ жисмларда макрокучланишлар вужудга келиши умумий шартлари қанақа?
18. Кўп қатламли қаттиқ жисм тузилмаларида макрокучланишларнинг қандай асосий манбалари мавжуд?
19. Дарзлар пайдо бўлиши сабаблари қандай?
20. Қаттиқ жисмда коваклар қандай ҳосил бўлади?
21. Макронуқсонлар қаттиқ жисм хоссаларига қандай таъсир кўрсатади?

VII БОБ

АМОРФ ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР. СУЮҚ КРИСТАЛЛАР

Критик нуқтадан йироқдаги қаттиқ жисмлар ва суюқликларни конденсирланган (зичланган) системалар дейилади ва улар газларга нисбатан миллионларча кичик қисилувчанликка эга. Масалан, NaCl кристаллининг қисилувчанлиги $0,3 \cdot 10^{-11}$ м²/н, суюқ симобники $-3,8 \cdot 10^{-11}$ м²/н, аммо атмосфера босими остидаги ҳавонинг қисилувчанлиги 10^{-5} м²/н.

Зичланган системаларда зарралар аро масофалар уларнинг диаметри чамасида, газларда эса атмосфера босими остида зарралараро ўртача масофалар уларнинг ўлчамларидан ўнларча ва кўпроқ марта катта бўлади.

Зичланган системаларда зарраларнинг иссиқлик ҳаракати тебранишлардан иборат, газларда эса зарралар илгариланма ҳаракат қилади.

Зичланган (конденсирланган) системаларнинг беш хили маълум: суюқликлар, шишалар, суюқ кристаллар, аморф жисмлар, қаттиқ кристаллар.

Суюқликлар — мувозанатли, изотроп, тузилиши тартибланмаган системалар бўлиб, оқувчанлик, яъни ўз шаклини осон ўзгартира олиш қобилиятига эгадир.

Шишалар — квазимувозанатли, изотроп, тузилиши тартибланмаган системалар бўлиб, қаттиқ жисмларнинг механик хоссаларига эга. Шишалар шаклини эластик ҳолатда ўзгартира олади, уларда бўйлама ва кўндаланг эластиклик тўлқинлари тарқала олади.

Аморф жисмлар — кучли даражада мувозанатсиз, мизатроп, тузилиши тартибланмаган системалар бўлиб, улар алоҳида шариоитда ҳосил бўлади.

Суюқ кристаллар — мувозанатли, анизотроп, тузилиши қисман тартибланган системалар бўлиб, катта оқувчанликка эга.

Қаттиқ кристаллар — мувозанатли, анизотроп, тузилиши қатъий тартибли системалардир.

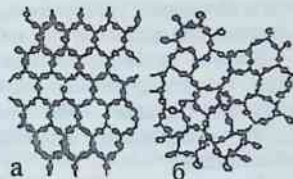
Бу маълумотни келтиришдан мақсад — зичланган система-лар хиллари орасидаги тафовутларни яна бир марта таъкид-лашдир.

7.1. Аморф қаттиқ жисмлар

Юнонча amorphos сўзи бизнингча шаклсиз деган маънони англатади. Табиатда аморф қаттиқ жисмлар кристал ҳолатидаги жисмлардан камроқ тарқалган.

Аморф ҳолат — модданинг изотроп хоссали бўладиган ва суюлиш нуқтаси (тайинли температураси) бўлмаган қаттиқ ҳолати. Температура ошганда аморф модда аста-аста суюқ ҳолатга ўтади. Бу хусусиятларнинг сабаби аморф ҳолатдаги

моддада аморф жойланишда кристалларга хос қатъий (7.1-чизма, а) даврийлик (тартиб) бўлмаганлигидир. Шу билан бир вақтда қўшни зарралар жойла-шишида муайян мослашув (яқин тартиб) мавжуд (7.1-чизма, б). Масофа ортиши билан бу мослашув йўқола бош-лайди ва бир неча атомлараро масофада йўқолади.



7.1- чизма. а — кристал; б — аморф қаттиқ жисм тузилиши

Яқин тартиб суюқликларга ҳам хос, аммо суюқликда (қовушоқлик ортган сари қийинлашади) қўшни зарраларнинг тез ўрин алмашиши юз беради. Шунинг аморф ҳолатдаги қаттиқ жисми жуда юқори қовушоқликка эга бўлган ўта со-вуган суюқлик деб қараса бўлади.

Паст температураларда кристалл ҳолати термодинамик жиҳатдан барқарор бўлади. Бироқ, кристалланиш жараёни мазкур температураларда жуда кўп актга чўзилиши мумкин, шунинг учун кристалл ҳолати амалда рўёбга чиқмайди. Суюл-мани тез совутганда аморф ҳолат ҳосил бўлади. Масалан, кварцни аввал суюлтирилади, сўнг уни тез совутиб аморф кварц шиша олинади. Дарвоқе, шиша ҳолатдан суюлмага ва суюлмадан шиша ҳолатга ўтиш қайтар жараён бўлиб, у фақат шу турдаги моддаларга хосдир. Шиша ҳосил бўлиши жараёни муайян температура оралиғида юз беради. Модданинг шиша

ҳолатидан кристалл ҳолатга ўтиш биринчи жинс фазавий ўтиш бўлади. Кўпи содда моддалар (S, Se, As, P), оксидлар (B_2O_3 , SiO_2 , FeO_2 ва бошқалар), сувли эритмалар (H_2SO_4 , H_3PO_4 , HCL) баъзи элементлар (Ge, As, P) халкогенидлари, баъзи галогенидлар ва карбонатлар сувли эритмалари шиша ҳолатида бўлиши мумкин. Шиша ҳолатидаги моддада атомлар ва атомлар гуруҳлари орасида устун равишда ковалент боғланиш мавжуд. Кўшни атомлар жойлашишида тартиб борлигини дифренциал тадқиқот усуллари аниқлаб беради.

Шиша ҳолатидаги моддалар изотроп, мўрт, ёрилган сиртда чуқур ҳосил бўлади, кўп ҳолда шаффоф бўлади. Бундай моддаларда қўшалок нур синиш кузатилади, люминесценция амалда кучсиз бўлади, уларнинг кўпи аслига диаметрик бўлиб, сийрак ер элементлари оксидлари қўшилганда улар парамагнитга айланади, электр хоссалари бўйича диэлектрик аммо айримлари ярим ўтказгич ва металл хоссаларга эга бўлади.

Металл шишалар металллар суюлмаларини жуда тез совутганда (совутиш тезлиги $v \leq 10^6$ град/сек) ҳосил бўлади. Металл шишалар таркиби: ~80% ўтма металллар (Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zr, Pг, ва бошқалар) ёки олий металллар ва ~20% кўп валентли металмаслар.

Мисоллар: $Au_{81}Si_{19}$, $Pd_{81}Si_{19}$, $Fe_{80}B_{20}$ 3-5 таркибловчили қотишмалар ҳам мавжуд. Бу моддаларни тадқиқлаш қаттиқ жисмларнинг металлик, магнит ва бошқа хоссаларини ўрганиш имконини беради. Юқори даражадаги мустақкамлик билан бирга катта пластиклик ва занглашга нисбатан юқори чидамлилиқ моддалар ва буюмларни мустақкамлашда мазкур шиша металллардан фойдаланиш имконини яратади. Уларнинг баъзилари ($Fe_{80}B_{20}$) ферромагнит бўлиб, паст коэрцетив кучга ва юқори магнит сингдирувчанликка эга ва уларни магнит юмшоқ материаллар сифатида қўллаш мумкин. Аморф магнит материалларнинг яна бир муҳим синфи — ўтма металллар аралашган сийрак ер элементлари қотишмаларидир.

Металл шишаларнинг электр ва акустик хоссаларидан (юқори катталикли ва температурага суғ боғланишли электр қаршилик, товушни кам ютиш) фойдаланиш имкониятлари бор.

Юқорида аморф моддаларнинг ярим ўтказгич хоссаларига эга бўлишлиги айтилмаган эди. Бундай моддаларнинг бир неча хил гуруҳлари бор: ковалент аморф яримўтказгичлар (аморф

ҳолатдаги Ge ва Si, GaAs ва бошқалар), оксид шишалар ($V_2O_5 - P_2O_5$), халкогенид шишалар ($As_{31} Ge_{30} Se_{21} Te_{18}$), диэлектрик пардалар (SiO_x, Al_2O_3, Si_3N_4 ва бошқалар) Аморф ярим ўтказгични кучли даражада компенсирланган ярим ўтказгич деб қаралади, бунда ўтказувчанлик зонаси "туби" ва валент зонанинг "шипи" флукуацияланади, улар тақиқланган зона E_g кенглиги тартибида бўлади (ярим ўтказгичда электронлар энергиялари зоналари ҳақида "Ярим ўтказгичлар" бобида батафсил тўхталамиз). ўтказувчанлик зонасида электронлар ва валент зонасидаги ко-ваклар юқори тўсиқлар билан ажралган потенциал чуқурларда жойлашган "томчи"ларга бўлиниб кетади. Паст температураларда аморф яримўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги маҳаллий ҳолатлар орасида сакрама тарзда бўлади (сакрама ўтказувчанлик). Юқорида температураларда аморф яримўтказгичларнинг электр ўтказувчанлигини электронларнинг умумлашган ҳолатларига иссиқлик ҳаракати энергияси эвазига ўтказилиши аниқлайди. Аморф яримўтказгичларнинг бир қатор ажойиб хоссаларидан турли амалий мақсадларда фойдаланиш мумкин. Халкогенид шишалар спектрининг ИҚ соҳасида шаффоф бўлганлиги, юқори электр қаршиликка ва фотосезгирликка эгаллиги туфайли телевизион трубкаларнинг электрофотографик пластинкаларини тайёрлашда ва голограммаларни ёзишда қўлланилади.

Аморф яримўтказгичларда юқори омли ҳолатдан паст омли ҳолатга ва аксинча қайта уланиш эффекти ёрқин ифодаланган, у ишга тушиш вақти $t \leq 10^{-10} - 10^{-12}$ с бўлган элементлар яратиш имконини беради.

Аморф моддалар ташқи таъсирлар — температура электр, магнит майдонлар, ёруғлик, деформация, киришмалар таъсирида ўз хоссаларини ўзгартира олишлиги билан бир қаторда уларни олишдаги технология жараёнларнинг қандай бориши ва қандай шароитда ўтказилишига боғлиқ бўлади.

7.2. Гидридланган аморф кремний ($\alpha - Si : H$)

70-йилларда (XX аср) аморф тузилишли кремнийдан амалий мақсадларда самарали фойдаланиш мумкинлиги исботлангандан кейин бу моддани ҳосил қилиш ва унинг физик-техник хоссаларини ўрганиш бўйича жадал тадқиқотлар

ўтказила бошлади. ҳозир бу йўналишда анчагина назарий ва амалий натижалар бор.

Муайян тагликда ўстирилаётган кремний (Si) пардасига (юпқа қатламига) водород (H) киритилса у ўсаётган пардадаги узилган кимёвий боғланишлар сонини камайтириши мумкин. Бундай кремнийни гидридланган аморф кремний дейилади ва α -Si:H шаклда белгиланади. Одатда α - Si:H бир неча усулда тайёрланади—милтиллама зарядсизланишда газларни парчалаш, ионлар киритиш ва катод пуркаш (чанглатиш) усуллари ишлаб чиқилган.

Милтиллама зарядсизланиш усулини қарайлик. Бу усулда силан (SiH_4) газини гелий (He) ёки арсений (As) газлари атмосферасида H_2 гази билан биргаликда парчалаш орқали α -Si:H пардалари ўстирилади. Юқори такрорийликни милтиллама зарядсизланишда қўзғатувчи индуктивлик ғалтаги ва зарядсизланиш камераси (бўлмаси) қурилма асоси бўлади. Бундай такрорийлик оралиғи 0,5-13,5 МГц, босим 0,1-2,0 мм.с.м. устуни, газнинг сарфи 0,2-5,0 см³/мин., ўстириш тезлиги 100 - 1000 айл/мин бўлади.

Тоза бир жинсли тузилиш ҳосил қилиш учун икки электродли қурилмадан милтиллама зарядсизланиш йўли билан газларни парчаланеди, бунда зарядсизланиш бўлмасида иккита параллел электрод жойлашган, у 13,5 МГц такрорийликда ишлайди.

Ўзгармас ток зарядсизланишидан ҳам α — Si:H олишда фойдаланиш мумкин. Агар таглик катод вазифасини бажарса, у ҳолда ўстириш тезлигини 0,1 дан 1,0 мкм/мин гача етказиш мумкин.

α — Si:H пардаларни анод тагликда ҳам ўстириш мумкин. Бу ҳолда ўстириш тезлиги катод таглик ҳолидагидан кичик бўлади, у билан газининг босимига токнинг катталигига ва тур электродининг ҳолатига боғлиқ.

Тагликни қиздириш чегараси тахминан 600° с гача мумкин дейилсада, аммо айрим ҳолларда таглик температураси 200 - 400°С ораликда бўлганда парда нуқсонли бўлиб қолиши мумкинлиги ҳам қайд қилинган, SiH_4 нинг босими юқори бўлганда милтиллама зарядсизланиш қурилмаларида ўстирилган пардаларда турли радикаллар пайдо бўлади, ёки полимерланиш кузатилади.

Гидриланган аморф кремний намуналари легириланмасдан тайёрланади, ammo ўстириш пайтидаги технологик жараён шартларини ўзгартириш ҳисобига Ферми сатҳи E_F силжитиши мумкин. Бу ҳодисани **псевдолегирлаш** дейилади. Бунда намуна панжарасининг ўзгаришлари ҳолатлар зичлиги $g(E)$ ни ўзгартиради, бу эса ўтказувчанлик электронлари зичлигини ўзгартиради, заряд ташувчиларнинг фаолланиш энергияси $\Delta E = E_C - E_F$ ҳам ўтказувчанликни ўзгартиради.

Псевдолегирлаш усули билан $\alpha\text{-Si:H}$ пардаларини (қатламларини) ўстириш учун триодли система қўлланилади. Триод түри кучланиш танланадики, бунда кучли зарядсизланиш анод – түр оралигида бўлади, газлар аралашмасининг парчаланиши анод – түр оралигида юз беради.

Шундай қилиб, аморф кремний олиш кристалл кремний олишга нисбатан анча арзон, бинобарин, унинг қўлланиш имкониятини оширади. Аморф моддаларнинг физик, технологик, техник жиҳатдан ўрганиши уларнинг қўлланиши соҳаларини тобора кенгайтирмоқда. Бундай материаллар янги ҳисоблаш машиналарида, ёзув ва алоқа воситаларида, айниқса қуёш энергиясидан фойдаланишда самарали равишда ишлатилмоқда, янги қўлланиш жабҳалари очилмоқда.

7.3. Суюқ кристаллар

Энди суюқ кристалларнинг тузилиши ва хоссаларига тегишли маълумотларни баён қиламиз.

Суюқ кристаллар қаттиқ жисм ва суюқ жисм орасидаги (мезаморф) фазалардир, улар кристаллга хос анизотропия хоссасига эга ва бир вақтда суюқликка хос оқувчанлик хоссасига эга. Суюқ кристаллар термодинамиканинг фаза тушунчасини қанотлантиради. Улар муайян температуралар оралигида мавжуд бўлади, ундан паст температураларда эса изотроп суюқликка айланади. Суюқ кристаллар молекуляр моддалардир ва уларнинг тузилиши кристалларга ва суюқликларга хос тузилишлар оралигида бўлади. Суюқ кристалларнинг физик хоссаларини бошқариш осон, бу хусусият уларнинг назарий ва амалий аҳамиятини тақозо қилади.

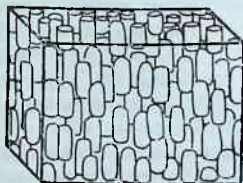
Суюқ кристалларнинг молекулалари чўзиқ бўлади ва бу биринчи навбатда, уларнинг тузилиши ҳамда хоссаларини

аниқлаб беради. Молекулалар орасида икки хил боғланиш — ёнлама ва охирлама боғланишлар мавжуд. Ёнланма боғланишлар молекулаларнинг бир-бирига параллел жойлашишига, охирланма боғланишлар занжирчалар кўринишда тузилишига олиб келади. Биринчи жойлашиш анизотропик хоссаларини пайдо қилади, молекулаларо таъсирнинг заифлиги оқувчанлик хоссасини аниқлайди.

Суyoқ кристалларнинг уч хили: нематик, смектик ва холестерик суyoқ кристалллар мавжуд.

1. *Нематик суyoқ кристалл* (юнонча «нема»-тола). Бундай кристалларда молекулалар ўқлари бир-бирига параллел йўналган, ammo молекулаларнинг ўзи бир бирига нисбатан ихтиёран силжиган (7.2- чизма).

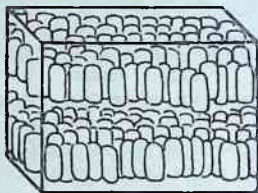
Оқибатда бундай моддада молекулаларнинг чизиқий йўналганлиги вужудга келади. Нематик кристаллар оптик жиҳатдан бир ўқли ва мусбат бўлади. Молекулалар ўқлари йўналиши билан бирдай бўлган оптик ўққа параллел равишда ёруғлик тарқалиши тезлиги мазкур ўққа тик йўналишдаги ёруғлик тезлигидан катта ($V_{11} > V_1$). Бинобарин, оддий нур ва нооддий нур синиш кўрсаткичлари ҳам тенг эмас, яъни $n_{11} < n_1$, бу эса мусбат кристаллар электр ва магнит майдонлар билан ўзаро таъсирлашади демакдир.



7.2- чизма. Нематик суyoқ кристалл.

Нематик кристалл бўлган параазоксианизолнинг (у бу ҳолатда 116° – 136° С оралиқда бўлади) қовушоқлиги оқим йўналишига тик бўлган кучсиз магнит майдонда кучли даражада ўзгаради.

2. *Смектик суyoқ кристалл* (юнонча смегма-совун). Бундай кристалларда молекулалар бир бирига параллел йўналган бир молекула қалинлигидаги ясси қатламларга тизилган бўлади (7.3- чизма).



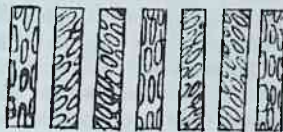
7.3- чизма. Смектик суyoқ кристалл.

Смектик суюқ кристалл мисоли совун пуфаги пардасидир (7.4-чизма), унинг ташқи ва ички сиртлари смектик қатламлардир. Сиртий қатламлардаги совун молекулаларининг ўзаро тортилиши пуфагининг барқарор бўлиши учун зарур бўлган сиртий тарангликни вужудга келтиради. Совун пуфагини шиширганда ва унинг ўлчами каттайганда парданинг совун эритмаси эркин молекулалар қатламларида жой эгаллаб пуфакнинг диаметрини орттиради. Пуфак қисилганда совун молекулалари қатламларидан қисиб чиқаради ва яна эритмага ўтади.

3. *Холестирик суюқ кристаллар.* Таркибида холестирин бўлган кўп бирикмалар суюқ кристалл фазаси ҳосил қилганидан бу ном келиб чиққан (холестириннинг ўзи бундай фаза ҳосил қилмайди). Холестерик суюқ кристаллар смектик-нематик турдаги аралаш тузилишга эга бўлади.

Уларда молекулалар смектиклардагига ўхшаш, параллел қатламларда жойлашади (7.4-

чизма), лекин ҳар бир қатламда молекулалар ўқлари нематик турдаги қатламларга параллел бўлади. Ҳар бир қатлам кўшни қатламга нисбатан муайян бурчакка бурилади. Холестерин молекуласи метил СН_3 гуруҳлар билан яеси тузи-



7.4-чизма Холестерик суюқ кристалл.

лишга эга, метил гуруҳлар эса молекула текислиги устида ва остида жойлашган. Ҳосил бўладиган учлик жойлар ҳар бир қатламда молекулалар ўқларининг олдинги қатлам ўқларига нисбатан ўртача 15° га бурилишига сабаб бўлади. Нативий бурилиш қатламлар сони ортган сайин ошиб бориб ~ 300 қатламга тенг қадамли спиралсимон тузилиши ҳосил қилади.

Холестеринлар оптик жиҳатдан бир ўқли ва манфий ($n_{11} > n_1$), молекулалари ўқлари йўналишлари (нематик ва смектик кристаллардан фарқли равишда) оптик ўққа тик бўлади. Холестериннинг спиралсимон тузилиши оптик активликнинг, яъни ёруклик қутбланиш тезлигининг бурилишига сабаб бўлади. Молекуляр қатламларга тик бўлган оптик ўқ бўйлаб ўтаётган чизикий қутбланган ёруклик ўз электр векторининг йўналишини изчил равишда спирал бўйича муайян бурчакка ўзгартириб боради, бу бур-

чак кристалл қалинлигига пропорционал бўлади. Масалан, α -кварцдан қутбланган ёруғлик ўтганда у 1 мм йўлда қутбланиш текислигини 20° га буради. Холектеристикларнинг оптик активлиги анча катта — у 18000° га етади, бу эса қалинликни 1 мм га 50 марта тўла айланишни ташкил қилади.

Энди уч хил суюқ кристалларни таърифлагач, уларнинг муҳим хосса ва хусусиятлари, қўлланишлари ҳақида тўхталамиз.

Суюқ кристаллари маълум бўлган кимёвий бирикмалар сони бир неча минг чамасида. Улар баъзи қаттиқ (мезоген) кристалларни қиздирганда ҳосил бўлади: даставвал суюқ кристал ҳолатга фазавий ўтиш юз беради, кейин қиздириш давом эттирилса суюқ кристал оддий изотроп суюқликка айланади. Ҳар бир суюқ кристал муайян температуралар оралиғида мавжуд бўлади (термометроп суюқ кристаллар). ўтиш иссиқлиги жуда кичик. Параазоксианизолнинг нематик сифатида мавжудлик соҳасини юқорида айтдик. Баъзи бирикмалар ва улар аралашмалари -40 дан $+80^\circ$ С гача оралиқда смектик суюқ кристалл бўлиши аниқланган. Холестерик суюқ кристаллар мисоллари—холестерик эфиридир. Баъзи органик моддалар смектик фазалар ҳосил қилади, кейингилари нематик суюқ кристалларга ўтиши мумкин. Бир неча смектик мезафазалар ҳосил қилувчи бирикмалар маълум, уларда молекулалар қатламларда ўзаро турлича жойлашган. Масалан, бис-фенилендиамин бирикмаси тўртта смектик ва битта нематик модификацияларга эгадир. Яна бошқа ажойиб суюқ кристаллар топилган.

Суюқ кристалларнинг уччала хилида ҳам *қўшалок нурсиниш* кузатилади. Эслатамиз: қўшалок нурсиндирадиган модда сиртига тушаётган қутбланмаган ёруғлик нури моддадан ўтаётиб чизиқий қутбланади икки нурга ажралади (оддий ва нооддий нурлар), уларнинг қутбланиш текисликлари ўзаро текис бўлади. Оддий ва нооддий нурларнинг тарқалиши теъликлари ва синиш кўрсаткичлари ҳар хил. Улар моддадан параллел дасталар тарзида чиқади. Бу ҳодисани тадқиқлаш йўли — модданинг суюқ кристаллик ҳолатини аниқлашда энг қулай усул ҳисобланади.

Холестерикларнинг молекуляр тузилиши ички молекуляр кучлар таъсирида жуда нозик равишда мувозанатланган, бу

мувозанат осон бузилиши мумкин. Молекулалар орасидаги заиф ўзаро таъсирни бузувчи ҳар қандай (оптик, иссиқлик, электр ва ҳоказо) таъсир холестерикнинг энг аввал оптик хоссаларини сезиларли ўзгартиришга олиб келади. Бу ҳодисаларнинг энг яққол мисоли температура озгина ўзгарганда холестерик рангнинг ўзгаришидир. Масалан уч холестерик аралашмасидан иборат пардада кўринадиган ёруғлик спектрида фақат 4 с температуралар оралиғида рангни ўзгартириш мумкин. Бундай пардалардан одамнинг касал аъзосини аниқлаш мақсадида одам танаси сиртида температуралар тақсимотини кузатиш учун фойдаланса бўлади. Холестерик паралгонатда температура ўзгариши градуснинг улушига қадар бўлганда ранг ўзгаради.

Холестерикларнинг кимёвий бирикмалар бугларига нисбатан фотосезгирлигига асосан баъзи ҳидларни аниқлайдиган асбоб ясалган.

Холестерикнинг спиралсимон тузилиши кўринадиган ёруғлик тўлқин узунлиги тартибида. Бундай даврий тузилмада ёруғликнинг Вулф-Брэггларнинг $\lambda = 2d \sin \theta$ ифодаси тавсифлайдиган интерференцияси (ва дифракцияси) кузатилади. Агар $d = 5000 \text{ \AA}$ бўлса, 7000 \AA тўлқин узунлиги (қизил) ёруғлик 45° га бурчак остида танловчан қайтарилади, 30° остида эса 5000 \AA (кўк) ёруғлик қайтарилади. Қайтарилыш бурчагининг муайян қийматида холестерик пардаси бор рангли бўлиб кўринади. Холестерикларнинг ёй камалак рангини уларнинг спиралсимон тузилиши даври кўринадиган ёруғлик тўлқин узунлиги тартибида эканлиги билан тушунтирилади. Сметтикларда молекуляр қатламлар орасидаги масофа бир неча ангстрен. Бу ҳолда рентген нурлар танловчан қайтарилади. Баъзи нематикларда қатламлар оралиги микронлар тартибида бўлади ва улар инфрақизил соҳадаги нурланишни танловчан қайтаради.

Суюқ кристаллар амалда кенг қўлланилади, айниқса ахборотга ишлов бериш ва тасвирлашда уларнинг электрооптик хоссаларидан фойдаланилади, суюқ кристаллар асосида ЭХМларнинг кейинги авлодлари яратилган. Суюқ кристаллардан электрон соатлар, микрокалькуляторлар, оптоэлектрон

қурилмалар ва бошқаларда қўлланилади. Ясси экранлар ишлаб чиқарилмоқда. Холестерик суюқ кристаллардан медицинада (баданнинг юқори температурали жойларини аниқлашда) ва техникада (ИК,УЮТ ва бошқа) нурланишларни кўрадиган қилишда, микроэлектрон схемалар сифатини назорат қилишда ва ҳақозолардан фойдаланилади.

Саволлар

1. Аморф қаттиқ жисмларнинг тузилишини тавсифланг.
2. Суюқ кристалларнинг қандай турлари бор?
3. Аморф ва суюқ кристаллар қаерда қўлланилади?

VIII БОБ

ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР СИРТИДАГИ ҲОДИСАЛАР

8.1. Умумий маълумот

Қаттиқ жисм сирти — ҳамма вақт икки фаза (муҳит)ни ажратиб турадиган чегарадир. Бу чегара бир томонда қаттиқ жисм ва иккинчи томондан, газ, суюқлик ёки бошқа қаттиқ жисм орасида бўлади. Шунинг учун ажратиш сирти чегаранинг ҳар икки томонидаги фазалар билан ўзаро таъсирлашади.

Сирт билан боғлиқ масалаларни ечиш ярим ўтказгичли асбобларни ишлаб чиқариш ва қўлланишида муҳим, чунки сирт хоссаларининг беқарорлиги, уларнинг беназорат ўзгаришлари асбобларнинг ишлаш муддатини камайтиради ва ишончли ишлашини пасайтиради.

Металлларнинг занглаши ва оқибатда уларнинг бузилиши ҳам сирт хоссаларига боғлиқ бўлади.

Қаттиқ жисм сиртининг баъзи умумий ҳолатлари ҳақида тўхталайлик. Биринчидан, сиртда кристалл ҳажмидаги атомларнинг даврий жойлашиши бузилади (кесилади), натижада тугалланмаган (узилган) кимёвий боғлар пайдо бўлади. Бошқача айтганда, сирт мавжудлигининг ўзи кристаллдаги ички потенциал даврий майдоннинг бузилишидир. Бу даврийликнинг ҳар қандай бузилиши маҳаллий энергетик ҳолатларни ёки сиртий ҳолатларни вужудга келтиради. Бундай сиртий ҳолатлар зичлиги $10^{18} - 10^{19} \text{ м}^{-2}$ тартибида бўлади, уларни **Тамм сатҳлари** дейилади. Иккинчидан, ҳақиқий шароитда қаттиқ жисмлар сиртида амалда ҳамма вақт оксид парда ёки ёпишган ёт атомлар ва ионлар бўлади. Шу туфайли сирт соҳаси мураккаб кўп қатламли тузилишга эга бўлади.

Кўп ҳолларда қаттиқ жисмлар сиртини қоплаган қатламларда маҳаллий сатҳлар ҳосил қилувчи киришмалар ва нуқсонлар бор. Кристаллнинг ўз сиртидаги ички ҳолатлар кучли электр майдони таъсиринга тез жавоб беради, уларни **тезкор ҳолатлар** дейилади. қатламлардаги (ташқи) ҳолатлар нисбатан анча секин таъсирланади, уларни **секин ҳолатлари** дейилади.

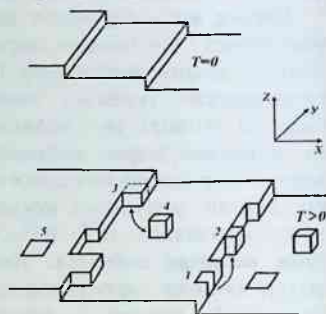
Сиртнинг миқдорий тавсифнома сиртий σ ёки фазалараро γ энергия бўлади. σ ни сиртий таранглик дейилади, у сиртни чегаралаган чизикни бирлик узунликка ва сирт юзини унга мос катталиқка қадар (миқдорга) ўзгартириш учун керак бўладиган кучни билдиради.

8.2. Сиртнинг тузилиши. Энергетик ҳолатлар

Ҳақиқий кристаллнинг сирт тузилиши анча мураккаб. Сирт деганда юпқа, лекин ҳажмий, қатлам тушунилади. Бу қатламлар қалинлиги кристалл панжараси доимийсидан ўнларча марта катта бўлиши мумкин. Ҳақиқий кристалл сиртида турли нуқсонлар кўп, ниҳоят, сирт ташқи муҳит билан тугашгани учун унинг шаклланишида кислород муҳим ўрин тутади. 150–200 нм қалинликли табиий оксид қатламлар амалда ҳамма вақт қаттиқ жисмларнинг сиртида мавжуд бўлади. Сирт гадур-будур бўлиб, дўнгликлар билан чуқурликлар навбатлашиб жойлашган.

Ҳозир сиртнинг манзараси 8.1-чизмадагидек бўлади деб, ҳисобланади.

Сиртда погоналар бўлади. $T > 0$ бўлганда флуктациялар тўфайли 1,2 бўш жойлар ҳосил бўлиши мумкин. Адсорцияланган (сиртга ёпишган) атом бўш жойни эгаллайди (3) ёки бўш поғонада қолади (4). Поғонада сиртий вакансиялар (5) ҳосил бўлиши мумкин. Сиртда нуқсонлар борлиги тўфайли мазкур атом ўзаро



8.1-чизма. $T=0$ ва $T>0$ да кристалл сиртининг тузилиши

таъсирлашаётган кўшнилар сони сиртнинг турли жойларида турлича. Шунинг учун атомнинг сирт билан боғлианиш энергияси турли бўлади.

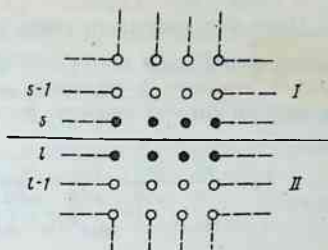
Энди турли кўринишдаги қаттиқ жисмларнинг эркин сиртий энергиясини ҳисоблайлик. Бунинг учун кристаллни ёрилиш сиртининг бир томонидаги, $s-1$, $s-2$ ва ҳоказо параллел текисликлар, иккинчи томонидаги l , $l-1$, $l-2$ ва ҳоказо параллел текисликлардан иборат деб тасаввур қиламиз (8.2-чизма). Кристалл ёрилганда ҳосил бўлган икки сиртли икки I ва II бўлақлар бўлади. Бу жараёнда сарфланган иш I ва II соҳасидаги атомларнинг боғлианишини узишга кетади. Агар энг яқин масофада жойлашган атомлар жуфтлари орасидаги ўзаро таъсирни эътиборга олсак, s - ва l - қатламдаги атомлар ўзаро таъсир энергиясини V_{sl} деб белгиласак сиртни ҳосил қилишга сарфланган тўла энергия

$$E_s = \frac{1}{2} \sum_{|s|} V_{sl}, \quad (8.1)$$

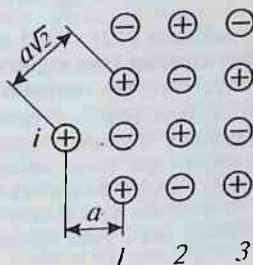
бундаги l — қўшимча равишда ($s-2$ ва $(l-1)$, ($s-2$) ва $(l-2)$ ва ҳоказо атомлар орасидаги ўзаро таъсирни ҳисобга оладиган кўпайтувчи ионлар кристалларида i мусбат ион 2 манфий ион билан тортишадилар, 3 мусбат ион билан итаришадилар ва ҳоказо. Бу ионлар занжирида умумий потенциал энергия (8.3- чизмага қаранг)

$$V_1 = -\frac{e^2}{a} + \frac{e^2}{2a} - \frac{e^2}{3a} + \frac{e^2}{4a} + \dots = -\frac{e^2}{a} \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right] = \varphi_1 e^2/a. \quad (8.2)$$

бунда $\varphi_1 \approx 0,6935$.



8.2-чизма. Атомларнинг турли сатҳларда жуфт-жуфт ўзаро таъсирни тизмаси.



8.3- чизма. Бир i ионнинг ионлар занжири уртасидан узилиб чиқиши: 1-3-ионлар занжирлари.

Энди ўша чизмадаги икки ўлчовли панжарани қарайлик. i ион α масофадаги ионга тортилади, $a\sqrt{2}$ иондан итарилади. Агар 1 ионнинг 2 вертикал занжирча ионлари билан ўзаро таъсирини ҳисобга олмасак, умумий потенциал энергия

$$V_2 = -\frac{e^2}{a} + \frac{2e^2}{a\sqrt{2}} - \frac{2e^2}{a\sqrt{5}} + \frac{2e^2}{a\sqrt{10}} - \dots + \frac{e^2}{2a} - \frac{2e^2}{a\sqrt{5}} + \frac{2e^2}{a\sqrt{8}} - \dots = \quad (8.3)$$

$$= -0.1144 e^2 / a = -\varphi_2 e^2 / a; \quad \varphi_2 = 0.1144$$

Шу йўсинда 1 ион билан кристал сирти орасидаги ўзаро таъсир энергияси олинади:

$$V_3 \approx -0.066 e^2 / a = -\varphi_3 e^2 / a. \quad (8.4)$$

Демак, V_1 - ионнинг занжирча бошидан ажралиш энергияси, V_2 - бутун занжирчадан, V_3 - яси тўр ўртасидан ажралиш энергияси бўлиб, уларнинг $N\alpha$ атомли панжара бўйича йигиндиси панжара энергиясини беради:

$$U_{пан} = 2N_A (\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3) e^2 / a. \quad (8.5)$$

2 кўпайтувчи (8.2) - (8.4) ифодалар текисликнинг бир ярмини ҳисобга олгани учун киритилган.

$2(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3)$ катталикини α_M **Маделунг доимийси** орқали белгиланади, бир хил турдаги панжарали қаттиқ жисмлар учун у бирдай бўлади. Мураккаброқ ҳолларни қарамасдан, юқоридаги ҳол билан яъни қарама-қарши бир зарядли ионлар панжараси ҳоли билан чекланамиз.

Молекуляр кристаллар учун (Ван дер Ваалс кучлари устун бўлганда) икки зарра орасидаги ўзаро таъсир энергияси

$$U_{1,2} = \xi_1 / a^m - \xi_a / a^n \quad (8.6)$$

кўринишда бўлиб, ξ_1 ва ξ_2 - доимий катталиклар, биринчи ҳад итаришиш, иккинчи ҳад тортишишни ҳисобга олади. Бундай кристаллар учун панжаранинг боғланиш энергияси

$$U_{пан} = (\xi_2 K_n / a_0^n) (1 - n/m) N / 2 \quad (8.7)$$

кўринишда олинган, бунда K_n - даража кўрсаткичи n га боғлиқ ($n=6$ деб олинса, $K_6=14.454$), a_0 - панжара доимийсининг мувозанатий қиймати, n ва m лар тажрибада аниқланади.

Ковалент кристалларда, масалан олмосда,

$$U_{пан} = (4/2)E_{c-c} = 2E_{c-c}, \quad (8.8)$$

бундаги E_{c-c} - карбон атомлари орасидаги боғланиш энергияси. Металл кристалларда $z=1$ (бир валентли металл) учун:

$$U_{пан} = (Na\alpha_m e^2/a_0)(1 - 1/n) \quad (8.9)$$

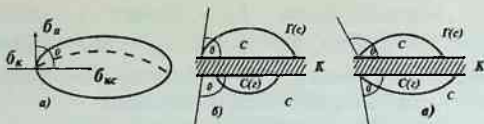
8.3. Хўлланиш ва ёйилиб оқиш ҳодисалари

Хўлланиш ҳодисаси сууюқликнинг қаттиқ жисм ёки бошқа сууюқлик сирти билан тегишганида юз беради. Бу ҳодиса металл-ярим ўтказгич контактларини тайёрлаш технологиясида катта аҳамиятга эга, чунки бу технологияда металл томчисини кристалл билан қотиштириш усули кенг қўлланилади. Бундай томчини қиздириш вақтида ёйилиб кетиши қотишиш юзини ва шу жараённинг ўзини аниқлайди.

Қаттиқ жисм сиртининг яхши хўлланиши, масалан, бу сиртни турли кимёвий моддалар томонидан тозаланиши самардорлигини таъминлайди. Жумладан, рўзгорий ювувчи моддалар қўлланиши шунга асосланган.

Хўллаш капилляр найчада мениск ҳосил қилади, қаттиқ сиртда томчининг шаклини ёки сууюқликка ботирилган жисм сиртида газ пуфаги шаклини аниқлайди. Хўллаш (хўлланиш) ҳодисасини контакт соҳасида уч фаза (жисм, муҳит) орасидаги ўзаро таъсир оқибати сифатида қаралса бўлади, аммо кўп ҳолларда у (масалан, сууюқ металллар билан қаттиқ металллар тегишиб турганда) кимёвий бирикмалар, қаттиқ ва сууюқ эритмалар ҳосил бўлиши, хўлланувчи жисмнинг сиртий қатламида диффузион жараёнлар юз бериши оқибати бўлади. Хўлланиш ҳодисасида хўлланиш иссиқлиги дейилувчи иссиқлик ажратиши мумкин.

Хўлланишнинг ўлчови вазифасини одатда четаравий θ бурчак бажаради, у хўлланувчи сирт ва сууюқликнинг периметр бўйича сирти орасидаги бурчакдир (8.4- чизма).



8.4- чизма. а- томчи қаттиқ сиртда; б- томчи; в - пуфакнинг қаттиқ сиртда турли ҳўлланиш шароитида вазияти; г - газ; с - суюқлик; к - қаттиқ жисм;

Статик (мувозанатий) ҳўлланишда θ суюқликнинг сирт таранглиги σ_c га, қаттиқ жисмнинг сирт таранглиги σ_k га ва чегарадаги фазалараро ξ_1/a^m таранглик σ_{kc} га Юнг тенгламаси $\cos\theta = (\sigma_k - \sigma_{kc})/\sigma_c$ орқали боғланган.

Агар $0^\circ < \theta < 90^\circ$ бўлса, суюқлик томчиси қисман ёки $\theta \rightarrow 0^\circ$ ҳолда сирт бўйича ёйилади (8.4.б,в- чизма). Агар $\theta > 90^\circ$ бўлса, томчи ёйилмайди (8.4.б,в- чизма). Биринчи ҳолда суюқлик қаттиқ жисми ҳўллайди, иккинчи ҳолда ҳўлламайди.

8.4. Электронлар эмиссияси ва сиртий ионлаш

Термоэлектрон эмиссия ҳодисаси қаттиқ жисми қиздириганда ундан вакуумга (бўшлиққа) ёки бошқа жисмга электронлар чиқарилишидан иборат. Қаттиқ жисмдан чиқиб кетиш учун электроннинг энергияси жисмдан ташқарида тинч турган электрон энергиясидан катта бўлиши керак. Бу энергияни чиқиш иши дейилади. $T \sim 300\text{K}$ (хона температураси) да термодинамик мувозанат шароитида, Ферми-Дирак тақсимотига асосан, энергияси чиқиш ишидан катта электронлар сони жуда-жуда кам, аммо температура ортиши билан бу сон жуда тез (экспотенциал) ортади. Шунинг учун термоэлектрон ток фақат қиздирилган жисмлардан чиқади. Агар чиққан электронларни олиб кетадиган электрик майдон бўлмаса, бу электронлар уларни чиқарган жисм сирти яқинида манфий ҳажмий электрик заряд ҳосил қилиб, термоэлектрик токни чеклаб қўяди. Эмиттер (электронлар чиқарувчи) ва анод (электронларни йиғувчи) орасидаги кучланиш кичик ($V < V_0$) бўлганда ток зичлиги $J \sim V^{3/2}$ қонун бўйича ифодаланadi. $V > V_0$ бўлганда ҳажмий заряд сўрилиб кетади ва ток тўйинишига I_0 қийматга эришади, кучланишини янада оширилса, яна секин

уса бошлайди. Туйиниш токи зичлиги (термоэлектрон эмиссия токи зичлиги) Ричардсон — Дэшман ифодасидан ҳисобланиши мумкин:

$$I_0 = AT^2 \exp(-\chi/kT). \quad (8.10)$$

Бундаги A — доимий, χ — электроннинг металлдан чиқиш иши. Агар электронларнинг қаттиқ жисм сиртидан қайтиш коэффиценти R ҳисобга олинса $A = A_0(1 - R)$ деб ёзилиши керак, бунда $A_0 = emk^2/2\pi^2\hbar^3 = 120,4 \cdot 10^4 \text{ A/m}^2\text{K}^2$. Ҳақиқий шароитда $\chi(T)$ эканини ва бошқа омилларни ҳисобга олинса, кўпчилик тоза металллар учун $A = (15 \div 350) \cdot 10^4 \text{ A/m}^2\text{K}^2$ (8.10) ифодани яримўтказгичларга ҳам қўлласа бўлади. Термоэлектрон эмиссия ҳодисаси кўп электрон асбобларда қўлланилади.

Термоэлектрон эмиссия билан сиртий ионлашиш ҳодисаси жипс боғланган. Бу ҳодиса қиздирилган (чўғланган) металл сиртига бугнинг атомлари ёки молекулалари урилганда содир бўлади. Атомлар ёки молекулалар қиздирилган металл сиртига ё уни ўраб олган буг атмосферасидан ёки махсус манбадан буглантириладиган молекуляр даста кўринишида келиб тушади. Уларнинг урилишидан ҳосил бўлган ионлар махсус коллектор (йигиновчи мослама) томонга йўналтирилади ва унинг занжирида ток пайдо қилади, бу ток кучи ионлар миқдорини баҳолаш имконини беради.

Сиртий ионлашишни сиртнинг 1см^2 дан 1с да кетаётган n_i ионлар қайтаётган n_a атомлар сонлари нисбати билан аниқланади:

$$n_i/n_a = \alpha. \quad (8.11)$$

α ни ионлашиш даражаси деб аталади. Баъзан бошқа муносабатдан фойдаланилади:

$$n_i/n_0 = \beta, \quad (8.12)$$

бунда n_0 — 1см^2 1с да сиртга тушаётган атомлар сони. β ни сиртий ионлашиш коэффиценти дейилади.

$n_i + n_a = n_0$ бўлганлиги учун

$$\beta = \frac{\alpha}{1 + \alpha} \quad (8.13)$$

бўлади. α катталик температурага боғлиқ. Бу боғланишни Саха-Ленгмюр ифодаси беради:

$$\alpha = (g_I/g_a) \exp[-(eV_I - X_I)/(kT)], \quad (8.14)$$

бундаги χ_I - металдан ионнинг чиқиш иши, V_I - қиздирилган металлга тушаётган атомнинг ионлашиш потенциали, g_I ва g_a - металл сиртидан кетаётган зарралар ҳолатларининг статистик вазвлари (масалан, ишқорий металл иони учун $g_I = 1$, атом учун $g_a = 2$).

Сиртий ионлаш ёрдамида мусбат ионлар ҳам, манфий ионлар ҳам ҳосил қилиниши мумкин. Ортиқча электронни узоқлаштириш учун манфий ионни «ионлашга» eU_s энергия сарфлаш керак. Шу энергияни электроннинг атомга яқинлиги дейилади, манфий иондаги «ортиқча» электроннинг энергетик сатҳини аниқлайди. Бу ҳолда Саха-Ленгмюр ифодасида ионлаш потенциали U_I ўрнида электроннинг атомга яқинлиги туради:

$$\alpha = n_I/n_a = (g_I/g_a) \exp[-(eU_s - X_I)/(kT)]. \quad (8.15)$$

8.5. Қаттиқ жисмлар сиртида адсорбция ҳодисаси

Газ атмосфераси билан туташган қаттиқ жисм сиртини тезда газ атомлари (молекулалари)нинг бир ёки кўп қатлами қоплайди. Шу ҳодиса адсорбциянинг моҳиятидир. Бунда қаттиқ жисмни адсорбент (ёпиштириб олувчи), газ фазасини эса адсорбат (ёпишувчи) дейилади. Адсорбциянинг икки хили бор: **физик адсорбция** ва **кимёвий адсорбция** (хемисорбция).

Физик адсорбция ҳолида атомлар (молекулалар)нинг адсорбцион (сиртга ёпишган) қатлами қаттиқ жисм сирги атомлари билан Вандер-Ваалс заиф кучлари воситасида боғланган. Физик адсорбциянинг муҳим тафовути – унинг қайтувчанлигидир.

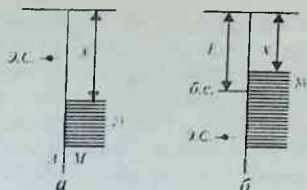
Қандайдир температуралар оралигида адсорбциянинг ҳар икки хилини бир-биридан кескин ажратиш бўлмайди.

Адсорбция ҳамма вақт экзотермик жараёндир, яъни иссиқлик ажраладиган (энталпия ΔH_S қадар ўзгарадиган) жараёндр.

Адсорбция иссиқлиги (энталпия) зичликнинг функцияси ва одатда у ортиши билан камаяди. Адсорбция иссиқлигининг бундай ўзгириш жараёнини изчил оқиб бориши туфайли юз беради. Бу жараён сиртнинг максимал энергияли жойларида — чўққилар, кристаллнинг бурчаклари ва қирраларида, дарзлар қиргоқларида, тирнамаларда ва шунга ўхшаш жойларда бошланади. Бу жойлар тўйингач, ясси сиртларда адсорбция бошланади. Уларда камроқ энергия ажралади.

Физик адсорбция энталпияси анча катта (≈ 10 ккал/мол). Бунда адсорбланган газ қатламини бошқа газ билан алмаштириш мумкин. Бу - алмашинув адсорбцияси ҳодисаси. Бунда ўринли қоида: газнинг қайнаш нуқтаси қанча юқори бўлса, у газ осон адсорбланади, яъни у осон суюқликка айланади. Адсорбция жараёни адсорбент ва адсорбат орасида адсорбцион мувозанат ўрнашганда яқунланади. Мувозанатнинг умумий шarti — иккала фазанинг кимёвий потенциалли (ферми сатҳлари) тенлигидир. Бу мувозанатда бирор вақтда сиртга қанча атом (молекула) адсорбланса, шунчаси сиртдан кетади, сиртни газ зарралари билан тўлдириш даражаси N_s ўзгармас бўлиб қолади. N_s температура ва босимга боғлиқ. Агар босим ўзгармас бўлса, $N_s(T)$ адсорбция изобараси. $T = \text{const}$ бўлса, адсорбция изотермасини ифодалайди. Албатта, температура кўтарилганда тўлдириш даражаси пасаяди, чунки бунда атомларнинг сиртдан кетиши (десорбция) кўняйди, бу эса адсорбцияни сусайтиради.

Хемосорбциянинг моҳияти шундаки, кимёвий табиатли кучлар таъсири ҳолатида адсорбланган атомлар ва кристаллнинг сиртидаги атомлар орасида кимёвий реакция юз беради, бирикмалар ҳосил бўлади. Хемосорбцияда адсорбент ва адсорбат орасида электронлар алмашиниши бош ўрин эгаллайди.



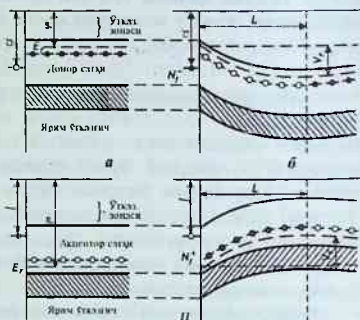
8.5- чизма Металлда катион ва анион хемосорбция; э.с. ва б.с. -эгалланган ва буш сатҳлар; А-адсорбат, М-металл.

Металларда хемосорбцияни қарайлик. 8.5- чизмада металл газ ва металл – адсорбат чегарасининг икки томонида электрон энергиялари спектри кўрсатилган. Бир ҳолда (8.5,а- чизма) адсорбатнинг эгалланган энг юқори энергия сатҳи металлнинг Ферми сатҳидан юқорида жойлашган. Бу ҳолда электрон атомдан металлга ўтади, унинг ўзи мусбат ионга айланади. Аксинча, агар адсорбентнинг юқориги сатҳи эгалланмаган бўлса ва у металлнинг ферми сатҳидан пастда бўлса, электрон металлдан атомга ўтиб уни манфий зарядлайди.

Чегаранинг икки томонида қўш электр қатлам ҳосил бўлади, оқибатда биринчи ҳолда металлдан чиқиш иши камаяди, иккинчи ҳолда $\Delta\chi=4\pi e N_s M$ катталиқ қадар ортади, бундаги N_s - сиртнинг бирлик юзида эгалланган жойлар сони, M - адсорбланган зарранинг дипол моменти.

Металларда хемосорбция ҳодисасига оид қурилган модел ярим ўтказгичлардаги хемосорбцияга ҳам тўла қўлланилади. Фарқ шундаки, металлга нисбатан ярим ўтказгичларда Ферми сатҳи бошқача жойлашган, ярим ўтказгичда n ва p — тур ўтказувчанлик мавжуд бўлади. 8.6- чизманинг юқориги (I) қисмида n — тур ярим ўтказгич сиртида мавжуд бўлган ҳол тасвирланган.

Ярим ўтказгичдаги муайян қатламдаги ўтказувчанлик электронлари адсорбат атомларига ўтади, уларни манфий зарядлайди. Бу чегарада электронлар учун ϕ потенциал тўсиқ ҳосил бўлади, бунда адсорбатдаги электронларнинг потенциал энергияси ярим ўтказгичдаги билан яъни ферми сатҳи билан тенглашади. Чегаравий қатламда ўтказувчанлик электронлари камайиб кетган, қатламнинг электронлари қаршилиги жуда катталашади. Бундай қатламни ёпувчи (беркитувчи) қатлам дейилади. 8.6- чизманинг пастки (2) қисмида p -тур ярим ўтказгич сиртида катион



8.6- чизма. Адсорбция тизмалари:

I-п-я.ў.да анион адсорбция,
II-р-я.ў.да катион адсорбция, а ва б- хемосорбциягача ва ундан кейин.

адсорбат мавжуд бўлган золда антиёпувчи (антиберкитувчи) қатлам ҳосил бўлиши тасвирланган.

Фан ва техниканинг қаттиқ жисмлар билан боғлиқ соҳалари учун суyoқ эритмалар билан туташган кристалл сиртидаги адсорбцион эффектлар муҳим бўлади.

Эритмадан кристалл сиртига адсорбцияланган сиртий-актив моддалар (С.А.М) дейилади.

8.6. Сиртий диффузия

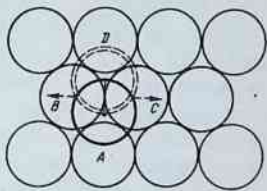
Симоб кристаллари ўсишини кузатиш мақсадида уни юқори вакуумда кучли даражада совутилган қаттиқ жисм сиртига буглантириб ўтқазилган. Ҳосил бўлган кристаллар пластинкасимон шаклга эга бўлган. Бу кристаллар қалинлик бўйича ўсишга нисбатан кенглик бўйича юз метрча тезроқ ўсган. Ушбу натижани фақат симоб атомларининг пластинкалари текислиги бўйича юқори суръатда диффузияланиши сабаби билан тушинтириши мумкин эди.

Сиртий диффузия D_s коэффицентини кўчаётган нуқсоннинг (вакансиянинг, адсорбланган атомнинг) диффузия D_d коэффицентининг уларнинг мувазанатий N_d зичлигига кўпайтмаси кўринишида ифодалаш мумкин:

$$D_s = N_d D_d = \frac{N_o}{2} \rho v_d \Delta^2 \exp[-(U_d' + U_d'')/(kT)] \quad (8.16)$$

Бу ифодада ρ – нуқсоннинг сакрашлар сони, Δ - сакрашлар узунлиги, v_d - нуқсоннинг сиртда тебраниш такрорийлиги, U_d' ва U_d'' - нуқсоннинг ҳосил бўлиши ва кўчиши энергиялари.

Мисол тариқасида 8.7- чизмада ёқий марказлашган куб (ё.м.к) панжарали кристаллнинг атомлари шарлар кўринишида тасвирланган, улар орасида адсорбланган атом (адатом) ажратиб кўрсатилган. Адатомнинг ҳар



8.7- чизма. Ёқий марказланган куб панжарали кристалда адатомли (111) текислик

бир қўшни билан кимёвий боғланиш энергиясини E орқали белгилаймиз. У атомнинг уч яқин қўшниси бор. Чизмада улар А, В, С атомлар. Адатом юқорига кўчиши билан унинг энг яқин қўшнилари иккита — В ва С атомлар бўлиб қолади. Олдинги ҳолатни мувазанатий ҳолат десак, кейинги ҳолатни фаолланиш (активланиш) ҳолати деб айтамыз. Ўз-ўзидан кўринадикки, фаолланиш учун $U_{\text{ао}} = 3E - 2E = E$ энергия талаб этилади. Лекин, фаолланиш ҳолатидаги адатомга узоқроқдаги қўшнилари А ва D атомлар ҳам таъсир қилади. Бу таъсир энергияси $2E'$ деб белгиланса, энди фаолланиш энергияси

$$U_{\text{ао}} = 3E - (2E + 2E') = E - 2E' \quad (8.17)$$

кўринишда ифодаланади. Аниқ ҳисоблар $U_{\text{ао}} = E/3 = H_s/20$ қийматни беради. бунда H_s - сублимация (қаттиқ жисм сиртидан буғланиш) иссиқлиги.

Cu, Ni, Ag, Au учун H_s мос равишда 73.3; 114; 82; 60 ккал/мол унча катта бўлмаган қийматларга эга, бундан қаралаётган ё.м.к панжара сиртида адатомлар жуда ҳаракатчан. Ҳаракатлантирувчи куч, масалан, температура градиенти бўлганда улар сирт бўйлаб шарчалардан думалаб боради.

Бошқа кристаллографик (001) ва (011) текисликларда (сиртларда) адатом билан сирт атомлари орасидаги тўрт ва беш боғланишни узиш зарур. Бу ҳолларда диффузияни фаоллаш энергияси каттароқ ва юқоридаги механизм устун бўлмаслиги мумкин.

Ёт, киришма атомларнинг сирт бўйича диффузияланиши учун адсорбланиш энергияси катта бўлган ҳолда адатомнинг кристалл сиртидаги атомлар билан боғланиши шунақа каттаки, юқоридаги «шар думалаш» механизми бутунлай мумкин бўлмайди. Бу ҳолда диффузия «ёзилувчи гилам» деб аталадиган механизм бўйича боради. Бунда киришма сирт бўйича қаттиқ фазада ёйилиб боради (бу 8.3 бандда кўрган суюқликнинг ёйилиб оқиши ҳолидагилек бўлади). Оқибат натижасида сирт моноатомли киришмавий қатлам билан қопланиб қолади.

Ҳарорат ортган сайин адсорбланиш энергияси камайиб боради, киришма адатомининг кристалл сиртидаги атомлар билан боғланиш энергияси камаяди ва сиртий диффузиянинг

бир қўшни билан кимёвий боғланиш энергиясини E орқали белгилаймиз. У атомнинг уч яқин қўшниси бор. Чизмада улар А, В, С атомлар. Адатом юқорига кўчиши билан унинг энг яқин қўшнилари иккита – В ва С атомлар бўлиб қолади. Олдинги ҳолатни мувазанатий ҳолат десак, кейинги ҳолатни фаолланиш (активланиш) ҳолати деб айтаемиз. Ўз-ўзидан кўринадики, фаолланиш учун $U_{\infty} = 3E - 2E = E$ энергия талаб этилади. Лекин, фаолланиш ҳолатидаги адатомга узоқроқдаги қўшнилари А ва D атомлар ҳам таъсир қилади. Бу таъсир энергияси $2E$ деб белгиланса, энди фаолланиш энергияси

$$U_{\infty} = 3E - (2E + 2E') = E - 2E' \quad (8.17)$$

кўрinishида ифодаланади. Аниқ ҳисоблар $U_{\infty} = E/3 = H_s/20$ қийматни беради. бунда H_s - сублимация (қаттиқ жисм сиртидан буғланиш) иссиқлиги.

Cu, Ni, Ag, Au учун H_s мос равишда 73.3; 114; 82; 60 ккал/мол унча катта бўлмаган қийматларга эга, бундан қаралаётган ё.м.к панжара сиртида адатомлар жуда ҳаракатчан. Ҳаракатлантирувчи куч, масалан, температура градиенти бўлганда улар сирт бўйлаб шарчалардан думалаб боради.

Бошқа кристаллографик (001) ва (011) текисликларда (сиртларда) адатом билан сирт атомлари орасидаги тўрт ва беш боғланишни узиш зарур. Бу ҳолларда диффузияни фаоллаш энергияси каттароқ ва юқоридаги механизм устун бўлмаслиги мумкин.

Ёт, киришма атомларнинг сирт бўйича диффузияланиши учун адсорбланиш энергияси катта бўлган ҳолда адатомнинг кристалл сиртидаги атомлар билан боғланиши шунақа каттаки, юқоридаги «шар думалаш» механизми бутунлай мумкин бўлмайди. Бу ҳолда диффузия «ёзилувчи гилам» деб аталадиган механизм бўйича боради. Бунда киришма сирт бўйича қаттиқ фазада ёйилиб борали (бу 8.3 бандда кўрган суюқликнинг ёйилиб оқиши ҳолидагилек бўлади). Оқибат натижасида сирт моноатомли киришмавий қатлам билан қопланиб қолади.

Ҳарорат ортган сайин адсорбланиш энергияси камайиб боради, киришма адатомнинг кристалл сиртидаги атомлар билан боғланиш энергияси камаяди ва сиртий диффузиянинг

бош механизми яна ўша «шар думалаш» механизми бўлиб олиши мумкин.

Адсорбланган пардалар биринчи навбатда кучли даражала сирт хоссаларини ўзгартиради, баъзи ҳолларда ҳатто қалинроқ сирт яқинидаги қатламларга ҳам таъсир кўрсатади. Адсорбланган пардалар ишқаланиш кучларига таъсир қилади. Ишқаланишни тавсифлайдиган коэффициент ҳамма вақт ишқаланувчи муайян икки сирт жуфтига ва уларнинг муайян ҳолатигагина тааллуқли бўлади. Ишқаланиш коэффициенти ишқаланиш кучининг тик равишдаги юкка нисбатига тенгдир.

Одатда адсорбланган пардалар ишқаланиш коэффициенти-ни камайтиради ва қаттиқ жисмларнинг ўзаро сирпанишига ёрдамлашади. Маълумки, ишқаланишни камайтириш учун турли мойлар ишлатилади. Икки хил мойлар мавжуд: гидродинамик ва чегаравий мойлар. Гидродинамик мойлар қалин суртилиб икки металл сиртларини бир-бирига тегиштирамайди. Чегаравий мойлар, аксинча, жуда юпқа ва мономолекуляр, ҳатто моноатомли қатламлардан иборат бўлади. Бундай пардалар металл қисмлар орасидаги тутинишни камайтиради ва бу қисмларнинг бевосита тегишишига имкон бермайди.

Адсорбция қаттиқ жисмларнинг мустақамлик хоссаларига муҳим даражада таъсир қилади. Масалан, қаттиқ жисмни пармалаганда ҳўллаш бу ишни осонлаштиради. Бундай адсорбция мустақамликни камайтириши кўриниб турибди. Кристаллар деформацияланишининг сиртий актив моддалар (С.А.М.) адсорбланиши оқибатида осонланиши ҳодисасини Ребиндер эффекти дейилади. Сиртий диффузия туфайли микродарзлар тезда С.А.М. молекулаларидан иборат суюқлик билан тўлади. Суюқликсиз фазалараро энергия γ_{λ} кристалл-ҳаво чегарасида аниқланади, суюқлик борлигида γ_c кристалл-суюқлик чегарасида аниқланади. Агар $\gamma_c < \gamma_{\lambda}$ бўлса, бу ҳолда кристалл ҳўлланганда янги сиртлар ҳосил бўлишига яъни жисмнинг бузилишига сарфланадиган энергия кам талаб қилинади.

Адсорбланган суюқлик дарз ичига кирганда у жойда $p_s = \gamma_{\lambda} - \gamma_c$ катталигидаги сиртий босим вужудга келади. У кристалл ичкари-сига йўналган ва дарзни узунлайди.

бир қўшни билан кимёвий боғланиш энергиясини E орқали белгилаймиз. У атомнинг уч яқин қўшнисни бор. Чизмада улар А, В, С атомлар. Адатом юқорига қўчиши билан унинг энг яқин қўшнилари иккита – В ва С атомлар бўлиб қолади. Олдинги ҳолатни мувазанатий ҳолат десак, кейинги ҳолатни фаолланиш (активланиш) ҳолати деб айтаемиз. Ўз-ўзидан кўринадикки, фаолланиш учун $U_{ad} = 3E - 2E = E$ энергия талаб этилади. Лекин, фаолланиш ҳолатидаги адатомга узоқроқдаги қўшнилари А ва D атомлар ҳам таъсир қилади. Бу таъсир энергияси $2E$ деб белгиланса, энди фаолланиш энергияси

$$U_{ad} = 3E - (2E + 2E') = E - 2E' \quad (8.17)$$

кўринишда ифодаланади. Аниқ ҳисоблар $U_{ad} = E/3 = H_s/20$ қийматни беради, бунда H_s - сублимация (қаттиқ жисм сиртидан буғланиш) иссиқлиги.

Cu, Ni, Ag, Au учун H_s мос равишда 73.3; 114; 82; 60 ккал/мол унча катта бўлмаган қийматларга эга, бундан қаралаётган ё.м.к панжара сиртида адатомлар жуда ҳаракатчан. Ҳаракатлантирувчи куч, масалан, температура градиенти бўлганда улар сирт буйлаб шарчалардан думалаб боради.

Бошқа кристаллографик (001) ва (011) текисликларда (сиртларда) адатом билан сирт атомлари орасидаги тўрт ва беш боғланишни узиш зарур. Бу ҳолларда диффузияни фаоллаш энергияси катгароқ ва юқоридаги механизм устун бўлмаслиги мумкин.

Ёт, киришма атомларнинг сирт буйича диффузияланиши учун адсорбланиш энергияси катта бўлган ҳолда адатомнинг кристалл сиртидаги атомлар билан боғланиши шунақа каттаки, юқоридаги «шар думалаш» механизми бутунлай мумкин бўлмайди. Бу ҳолда диффузия «ёзилувчи гилам» деб аталадиган механизм буйича боради. Бунда киришма сирт буйича қаттиқ фазада ёйилиб борали (бу 8.3 бандда кўрган суюқликнинг ёйилиб оқиши ҳолидагилек бўлади). Оқибат натижасида сирт моноатомли киришмавий қатлам билан қопланиб қолади.

Ҳарорат ортган сайин адсорбланиш энергияси камайиб боради, киришма адатомининг кристалл сиртидаги атомлар билан боғланиш энергияси камаяди ва сиртий диффузиянинг

бош механизми яна ўша «шар думалаш» механизми бўлиб олиши мумкин.

Адсорбланган пардалар биринчи навбатда кучли даражада сирт хоссаларини ўзгартиради, баъзи ҳолларда ҳатто қалинроқ сирт яқинидаги қатламларга ҳам таъсир кўрсатади. Адсорбланган пардалар ишқаланиш кучларига таъсир қилади. Ишқаланишни тавсифлайдиган коэффицент ҳамма вақт ишқаланувчи муайян икки сирт жуфтига ва уларнинг муайян ҳолатигагина тааллуқли бўлади. Ишқаланиш коэффиценти ишқаланиш кучининг тик равишдаги юкка нисбатига тенгдир.

Одатда адсорбланган пардалар ишқаланиш коэффиценти-ни камайтиради ва қаттиқ жисмларнинг ўзаро сирпанишига ёрдамлашади. Маълумки, ишқаланишни камайтириш учун гурли мойлар ишлатилади. Икки хил мойлар мавжуд: гидродинамик ва чегаравий мойлар. Гидродинамик мойлар қалин суртилиб икки металл сиртларини бир-бирига тегиштирамайди. Чегаравий мойлар, аксинча, жуда юпқа ва мономолекуляр, ҳатто моноатомли қатламлардан иборат бўлади. Бундай пардалар металл қисмлар орасидаги тутинишни камайтиради ва бу қисмларнинг бевосита тегишишига имкон бермайди.

Адсорбция қаттиқ жисмларнинг мустаҳкамлик хоссаларига муҳим даражада таъсир қилади. Масалан, қаттиқ жисмни пармалаганда ҳўллаш бу ишни осонлаштиради. Бундай адсорбция мустаҳкамликни камайтириши кўриниб турибди. Кристаллар деформацияланишининг сиртий актив моддалар (С.А.М.) адсорбланиши оқибатида осонланиши ҳодисасини Ребиндер эффекти дейилади. Сиртий диффузия туфайли микродарзлар тезда С.А.М. молекулаларидан иборат суюқлик билан тўлади. Суюқликсиз фазалараро энергия γ_x кристалл-ҳаво чегарасида аниқланади, суюқлик борлигида γ_c кристалл-суюқлик чегарасида аниқланади. Агар $\gamma_c < \gamma_x$ бўлса, бу ҳолда кристалл ҳўлланганда янги сиртлар ҳосил бўлишига яъни жисмнинг бузилишига сарфланадиган энергия кам талаб қилинади.

Адсорбланган суюқлик дарз ичига кирганда у жойда $p_s = \gamma_c - \gamma_x$ катталигидаги сиртий босим вужудга келади. У кристалл ичкарасига йўналган ва дарзни узунлайди.

Баъзи металллар С.А.М. вазифасини бажаради. Масалан, симоб пардаси билан қопланган рух пластинкаси мўрт бўлиб қолади. Темир сим сиртига ўтказилган қалайи пардаси ҳам худди ўшандай таъсир кўрсатади.

Бу айтилган эффектга қарама-қарши эффект ҳам маълум-турли пардалар билан қопланган қаттиқ жисмларнинг мустақамлиги ортиши ҳам кузатилади (Роско эффекти). Бунинг сабаби шуки, сиртий парда жисмнинг ҳажмидан дислокацияларнинг унинг сиртига чиқишини тўсади. Шунинг учун дислокациялар қоплами остида тўпланади ва бу кристалл мустақамлигини оширишга олиб келади.

Назорат учун саволлар

1. Сиртий сатҳлар табиатини тушинтиринг.
2. Қандай сиртий ҳолатларни тезкор ва секинкор ҳолатлар дейилади?
3. Сиртий таранглик тушунчаси таърифини беринг.
4. Сиртий эффектларнинг асосий кўринишларини баён қилинг.
5. Электронларнинг чиқиш иши нима?
6. Сиртий ионлашиш нима?
7. Адсорбент ва адсорбат деб қандай моддаларга айтилади?
8. Физик адсорбция нимадан иборат?
9. Хемисорбция нима?
10. Металл суюқ эритма чегараси яқинидаги қўш электрик қатлам пайдо бўлишини тушинтиринг.
11. Сиртий диффузия механизмларини тавсифланг.
12. Ребиндер эффекти нима?
13. Роско эффекти нима?

Масалалар

1. N_A Авогадро сони қийматини кўйиб, a ни $3 \cdot 10^{-8}$ см деб ҳисоблаб (8.2) - (8.5) ифодалар асосида ионлар панжараси энергияси $U_{пан}$ ни аниқланг.

2. Металл кристалли учун (8.9) ифода бўйича панжара энергиясини топинг. $\alpha_m = 1.75$, $a_0 = 5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $n = 3$.

3. $A = 120 \cdot 10^4 \text{ ампер/м}^2 \text{к}^2$, $T = 1000 \text{ К}$, $\chi = 5 \text{ эВ}$ бўлганида (8.10) ифода бўйича термоэлектрон гўйиниш токи зичлигини аниқланг.

4. (8.15) ифода бўйича ионлашиш даражасини топинг.

$$eU_s = 9 \text{ эВ}, \quad \chi = 8 \text{ эВ}, \quad g_I / g_a = 1/2$$

5. (8.17) ифодадан $E^I = \frac{1}{3} E$ ва $E = 3 \text{ эВ}$ бўлганида ада-

томнинг фаолланиш энргиясини аниқланг.

6. Юнг $\cos\theta = (\sigma_k - \sigma_{\chi c}) / \sigma_c$ тенгламасидан фойдаланиб, қачон суюқлик қаттиқ жисмни ҳўлловчи, қачон ҳўлламайдиган бўлишини таҳлил қилинг.

IX БОБ

ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР ДЕФОРМАЦИЯСИ

Ушбу бобда қаттиқ жисмларнинг деформацияланиш қонуниятларини кўриб чиқамиз. Бунда қаттиқ жисмни узлуксиз муҳит деб қараймиз. Қаттиқ жисмни чексиз кичик зарраси деб, атом ёки молекулалар сони етарлича кўп бўлган узлуксиз кичик бўлаги назарда тутилади. Ташқи кучлар йўқлигида қаттиқ жисм зарралари мувозанат вазиятларда туради.

Зарраларнинг ушбу вазиятларини жисм билан маҳкам боғланган саноқ системаси бошидан ўтказилган радиус-вектор r орқали аниқлаймиз. Ташқи кучлар таъсирида қаттиқ жисмни ташкил қилган зарралар вазиятлари, қаттиқ жисмнинг ҳажми, шакли ўзгаради, яъни қаттиқ жисм деформацияланади. Зарраларнинг мувозанат вазиятларидан силжишини \bar{u} вектор билан ифодалаймиз. Бу вектор силжиш вектори деб аталади. Деформацияланган жисмдаги зарра вазияти $\bar{r} + \bar{u}$ вектори билан аниқланади. Силжиш векторининг координата ўқларидаги ташкил этувчиларини мос ҳолда u_x, u_y, u_z билан белгилаймиз. Ушбу катталиклар умумий ҳолда зарранинг координаталарига ва вақтига боғлиқ бўлади, яъни:

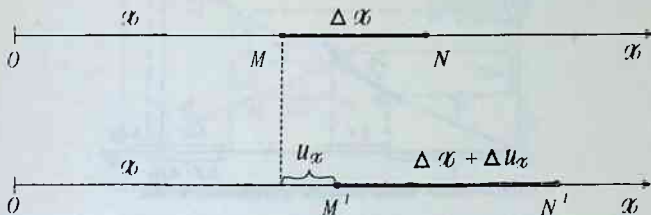
$$u_x = u_x(x, y, z, t), u_y = u_y(x, y, z, t), u_z = u_z(x, y, z, t).$$

Деформацияланган ҳолатни тўлиқ тавсифлаш учун силжиш вектори \bar{u} ни координаталар (x, y, z) нинг функцияси кўринишда ифодалаш зарур. Тушуниш осон бўлиши учун биз бу масалани аввал бир ўлчовли, кейин икки ва уч ўлчовли деформациялар билан кўриб чиқамиз.

9.1. Бир ўлчовли деформация

Деформация x йўналишида юз бераётган бўлсин.

Деформацияланган жисмда Δx оралиқни танлаб оламиз, (9.1-чизма).



9.1- чизма. Бир ўлчовли деформацияга оид.

Деформациялангандан сўнг M нуқта \vec{u} масофага силжийди, M' вазиятга кўчади ва унинг координатаси $x+u_x$ га тенг бўлади. Биз танлаган Δx кесма эса Δu_x қадар узунлашади. $|MN|$ кесманинг деформацияси деганда биз Δu_x нинг Δx га нисбатини, яъни $\Delta u_x / \Delta x$ ни тушунаемиз. M нуқтадаги деформация эса

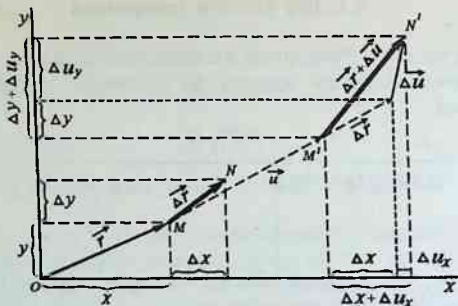
$$\epsilon = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u_x}{\Delta x} = \frac{du_x}{dx} \quad (9.1)$$

ифода билан аниқланади. Умумий ҳолда ϵ катталики координата ва вақтга боғлиқ бўлади: $\epsilon = \epsilon(x, t)$. Агар $\epsilon = \text{const}$ бўлса, бундай деформацияни бир жинсли деформация деб аталади.

9.2. Икки ўлчовли деформация

Энди x, y текисликдаги $\Delta \vec{r}$ кесманинг деформацияланишини кўриб чиқамиз (9.2- чизма).

Координаталари (x, y) ва радиус-вектори \vec{r} бўлган M нуқта деформациядан сўнг M' нуқтага кўчади. M' нуқтанинг радиус вектори $\vec{r} + \vec{u}$ га тенг бўлади. N нуқта, мос ҳолда, N' нуқтага кўчади. Биз танлаб олган кесма деформациядан сўнг текисликда маълум бир масофага силжийди ва Δu га чўзилади.



9.2- чизма. Икки ўлчовли деформацияга оид.

$\Delta u_x/\Delta x$ ва $\Delta u_y/\Delta y$ катталиклар $\Delta \bar{\gamma}$ кесманинг x ва y ўқларидаги проекцияларининг чўзилишини белгилайди. Аммо, бу катталиклар икки ўлчовли деформацияни тўлиқ ифодалай олмайди, чунки чизмадан кўриниб турибдики, кесма чўзилишдан ташқари, яна маълум бир бурчакка бурилади.

Кесманинг бурилишини ифодалаш учун $\Delta \bar{\gamma}$ кесмага тенг катетлари Δx ва Δy бўлган тўғри тўртбурчакнинг деформацияланишини кўриб чиқамиз (9.3- чизма).

Чизмадан кўриниб турибдики, $M'A'$ кесманинг бурилиш бурчаги тангенс $tg \varphi_{yx} = \frac{\Delta u_y}{\Delta x + \Delta u_x}$, шунингдек $M'B'$ кесманинг

бурилиш бурчаги $tg \varphi_{xy} = \frac{\Delta u_x}{\Delta y + \Delta u_y}$ бўлади. Биз кичик деформа-

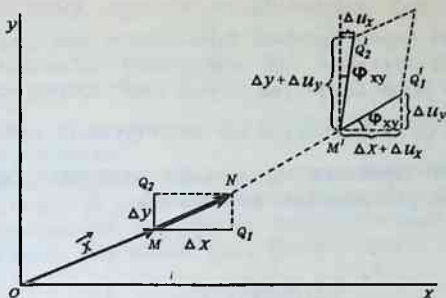
циялар билан чегараланамиз, шунинг учун $\Delta u_x/\Delta u_y$ лар Δx ва Δy ларга нисбатан анча кичик бўлади. Δx ва Δy лар нолга интилганда (бунда махражларда $\Delta u_x=0$, $\Delta u_y=0$)

$$tg \varphi_{yx} = \varphi_{yx} = \frac{\partial u_y}{\partial x} = \varepsilon'_{yx}, \quad tg \varphi_{xy} = \varphi_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} = \varepsilon'_{xy}$$

бўлади.

Ушбу кесманинг чўзилиши эса,

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}$$



9.3- чизма. Бурилиш деформациясини ҳисобга олиш.

катталиклар билан ифодаланади. Юқорида келтирилган ифодалардан фойдаланиб, $\Delta \bar{u}$ нинг ташкил этувчиларини қуйидагича ёзиб олишимиз мумкин:

$$\left. \begin{aligned} \Delta u_x &= \frac{\partial u_x}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial u_x}{\partial y} \Delta y = \varepsilon_{xx} \Delta x + \varepsilon'_{xy} \Delta y \\ \Delta u_y &= \frac{\partial u_y}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial u_y}{\partial y} \Delta y = \varepsilon'_{yx} \Delta x + \varepsilon_{yy} \Delta y. \end{aligned} \right\} \quad (9.2)$$

Одатда деформация коэффициентини белгилашда x, y, z ўрнига мос ҳолда 1, 2, 3 рақамлари ишлатилади, яъни: $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{11}$, $\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{22}$, $\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{23}$. Шундай қилиб, ε_{ik} катталиклар $\Delta \bar{u}$ вектори билан $\Delta \bar{r}$ векторини боғловчи иккинчи ранг тензор ҳосил қилади:

$$\varepsilon'_{ik} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon'_{12} \\ \varepsilon'_{21} & \varepsilon_{22} \end{bmatrix} \quad (9.3)$$

Бу ифодадаги $\varepsilon'_{12} = \varphi_{xy}$, $\varepsilon'_{21} = \varphi_{yx}$ катталиклар жисмнинг силжиш деформациясини аниқлайди. Ундан ташқари, бу катталиклар жисмнинг бурилишини ҳам ўз ичига олади. Агар жисм деформация натижасида ўлчамларини ўзгартирмасдан фақат маълум бир бурчакка бурилса, у ҳолда деформация тензори $\varepsilon'_{ik} = \begin{bmatrix} 0 & -\varphi \\ \varphi & 0 \end{bmatrix}$ кўринишда бўлади. Демак, умумий ҳолда

ϵ'_{ik} тензори соф деформациядан ташқари жисмнинг ҳамма қисмларини бирор бурчакка бурилишини ҳам ҳисобга олар экан. Ушбу тензордан соф деформация тензорини ажратиб олиш учун ундан симметрик тензор ҳосил қилиш зарур. Бундай тензор ҳосил қилишнинг энг содда усули $\epsilon_{ik} = \frac{\epsilon'_{ik} + \epsilon'_{ki}}{2}$.

Кўриниб турибдики, $\epsilon_{ik} = \epsilon_{ki}$ шарт юқоридаги ифода учун бажарилади. (9.3) ифодадан фойдаланиб,

$$\epsilon_{ik} = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \frac{1}{2}(\epsilon'_{12} + \epsilon'_{21}) \\ \frac{1}{2}(\epsilon'_{21} + \epsilon'_{12}) & \epsilon_{22} \end{bmatrix} \quad (9.4)$$

ҳосил қиламиз. Бу ифодада $\frac{1}{2}(\epsilon'_{21} + \epsilon'_{12}) = \epsilon_{12} = \epsilon_{21} = \frac{1}{2\varphi_{12}}$, яъни тўлиқ силжиш бурчагининг ярмига тенг. Ушбу (9.4) ифода билан аниқланган иккинчи рангли симметрик тензор деформация тензори дейилади.

9.3. Уч ўлчовли деформация

Уч ўлчовли жисм учун юқоридаги амалларни такрорлаб, уч ўлчовли параллелепипед деформациясини кўриб ўтиш мумкин. Унда бизга яна бир ташкилловчи $\frac{du_i}{dz} = \epsilon_{33}$ қўшилади ва мос ҳолда силжишларни ифодаловчи ташкилловчи пайдо бўлади. Бу ҳолда деформация тензори

$$\epsilon_{ik} = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (9.5)$$

кўринишда ёзилади. Бу ерда ϵ_{11} , ϵ_{22} , ϵ_{33} , мос ҳолда x , y , z ўқлар бўйича жисмнинг чўзилиши (ёки сиқилиши).

$$\epsilon_{12} = \epsilon_{21} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \frac{1}{2} \varphi_{12},$$

$$\varepsilon_{21} = \varepsilon_{32} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) = \frac{1}{2} \varphi_{23}, \quad (9.6)$$

$$\varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) = \frac{1}{2} \varphi_{13}$$

лар эса xz , yz ва xz текисликлар бўйича жисмнинг силжиш бурчаклари ярмидир.

Шундай қилиб, кичик деформацияларда координаталари x , y , z бўлган бирор M нуқта атрофидаги жисмнинг деформацияланиши деформация тензорининг олти мустақил ташкилловчилари билан ифодаланар экан. Ушбу тензорни

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \quad (9.7)$$

кўринишда ҳам ёзиш мумкин, бунда ik лар 1, 2, 3 қийматларни олади. Деформация тензорини симметрияга эгаллиги уни содда, яъни бир индексли кўринишда ёзишга ҳам имкон беради:

$$(\varepsilon_{ik} \rightarrow E_n, n = 1, 2, \dots, 6)$$

$$\varepsilon'_{ik} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \cdot & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \cdot & \cdot & \varepsilon_{33} \end{bmatrix}; \quad E_n = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \varepsilon_6 \varepsilon_5 \\ \cdot \varepsilon_2 \varepsilon_4 \\ \cdot \cdot \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

Кичик бўлмаган ихтиёрий деформациялар учун деформация тензорининг аниқ ифодаси

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_l} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (9.8)$$

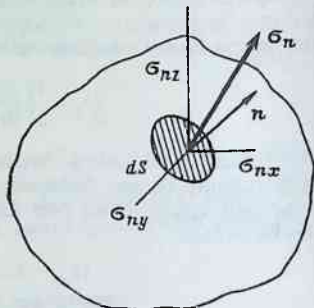
кўринишда ёзилади. Кичик деформацияларда ушбу ифодани (9.7) ифода билан алмаштириш мумкин.

9.4. Кучланиш тензори

Деформацияланмаган жисмнинг ҳамма қисмлари бир-бири билан механик мувозанат ҳолатида бўлади. Жисм деформацияланганда у мувозанат ҳолатидан чиқади. Натижада унга мувозанат ҳолатига интилувчи кучлар таъсир қилади. Жисмда бирор деформацияланган бўлакни танлаб оламиз. Бўлакка, ал-

батта, таъсир қилувчи ички кучлар пайдо бўлади. Бу кучлар танланган булакнинг юзаси орқали таъсир қилади. Ушбу бўлимда фақат юза бўйлаб таъсир қилувчи кучларни кўриб чиқамиз. Ҳажмий кучларни (масалан, оғирлик кучи) ҳисобга олинмайди. Таъсир қилаётган кучнинг шу сирт юзасига нисбати механик кучланиш деб аталади. Деформацияланган жисмнинг ихтиёрий ҳажми сиртида элементар юза ажратиб оламиз (9.4- чизма). Ушбу юзага ташқи бирлик нормал \vec{n} векторни ўтказамиз. Умумий ҳолда кучланиш вектори нормал вектор билан бир хил йўналишга бўлиши мумкин. Агар кучланиш вектори \vec{n} нормал вектор билан ўткир бурчак ҳосил қилса (жисми чўзувчи кучланиш) бундай кучланиш йўналиши мусбат деб қабул қилинган.

Кучланиш вектори $\vec{\sigma}_n$ ни ўзаро ортогонал учта ташкил этувчи $\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3$ векторларга ажратиш мумкин. Ўз навбатида ҳар бир ташкил этувчиларнинг координаталар ўқида учта проекциялари мавжуд. Натижада тўққизта катталиқ ҳосил бўлади. Бу катталиқлар кучланиш тензорини ташкил қилади:



9.4- чизма. Кучланиш тензорига оид.

Натижада тўққизта катталиқ ҳосил бўлади. Бу катталиқлар кучланиш тензорини ташкил қилади:

$$\sigma_{ik} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (9.9)$$

Кучланиш тензори ҳам симметрик тензор бўлганлиги туфайли уни олтита мустақил катталиқка келтириб олишимиз мумкин:

$$\sigma_{ii} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \cdot & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \cdot & \cdot & \sigma_3 \end{bmatrix} \quad (9.10)$$

Ушбу тензор симметрияси уни диагонал ҳолатга келтириш-га ҳам имкон беради. Бу ҳолда барча силжима кучланишлар йўқолиб фақат диагонал ташкилловчилар қолади:

$$\sigma_{ii} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}. \quad (9.11)$$

(9.9) ва (9.10) ифодалар бирор нуқта атрофидаги механик кучланишни ифодалайди. Агар бир нуқтадан иккинчи нуқтага ўтганда ва вақт ўтиши билан кучланиш ўзгармаса, бундай кучланиш статик кучланиш деб аталади. Лекин умумий, динамик ҳолда кучланиш вақтнинг ва координаталарнинг функцияси-дир.

9.5. Деформация билан механик кучланиш орасидаги боғланиш. Умумлашган Гук қонуни. Эластиклик модуллари

Деформация ва кучланишни биз алоҳида кўриб чиқдик, лекин, бу икки катталиқ бир-бирига доим боғлиқдир. Бирор нуқта атрофида кучланиш ҳосил қилинса, бу ерда жисм албатта, маълум даражада деформацияланади ва деформацияланган жисмда (эластик жисм назарда тутиляпти) кучланиш ҳосил бўлади. Шундай экан, ушбу катталиқлар орасида боғланиш мавжуд бўлиб, кичик деформациялар учун бу боғланишни умумлашган Гук қонуни деб аталади ва қуйидагича ёзилади:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1 &= c_{11}\epsilon_1 + c_{12}\epsilon_2 + c_{13}\epsilon_3 + c_{14}\epsilon_4 + c_{15}\epsilon_5 + c_{16}\epsilon_6 \\ \sigma_2 &= c_{21}\epsilon_1 + c_{22}\epsilon_2 + c_{23}\epsilon_3 + c_{24}\epsilon_4 + c_{25}\epsilon_5 + c_{26}\epsilon_6 \\ \sigma_3 &= c_{31}\epsilon_1 + c_{32}\epsilon_2 + c_{33}\epsilon_3 + c_{34}\epsilon_4 + c_{35}\epsilon_5 + c_{36}\epsilon_6 \\ \sigma_4 &= c_{41}\epsilon_1 + c_{42}\epsilon_2 + c_{43}\epsilon_3 + c_{44}\epsilon_4 + c_{45}\epsilon_5 + c_{46}\epsilon_6 \\ \sigma_5 &= c_{51}\epsilon_1 + c_{52}\epsilon_2 + c_{53}\epsilon_3 + c_{54}\epsilon_4 + c_{55}\epsilon_5 + c_{56}\epsilon_6 \\ \sigma_6 &= c_{61}\epsilon_1 + c_{62}\epsilon_2 + c_{63}\epsilon_3 + c_{64}\epsilon_4 + c_{65}\epsilon_5 + c_{66}\epsilon_6 \end{aligned} \right\} \quad (9.12)$$

Ушбу ифодани қисқача матрица кўринишда ёзиш ҳам мумкин:

$$\sigma_{ii} = c_{iiii} \epsilon_{iii}, \quad (9.13)$$

бу ерда $n, m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Тензор кўринишда ёзиш учун эса иккита индекс сақланиши керак:

$$\sigma_{ik} = c_{ijkl} \epsilon_{ij} \quad (9.14)$$

(9.13) ифодадаги c_{ijkl} коэффициентлар чизиқий эластиклик модуллари деб аталади. Ушбу тензор ҳам симметрияга эга, шунинг учун унинг 36 та ташкилловчисидан 21 та мустақил компонентага келтиришимиз мумкин. Эластиклик модули матрица кўринишда қуйидагича ёзилади:

$$c_{ijkl} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} & c_{41} & c_{51} & c_{61} \\ c_{21} & c_{22} & c_{32} & c_{42} & c_{52} & c_{62} \\ c_{31} & c_{23} & c_{33} & c_{43} & c_{53} & c_{63} \\ c_{41} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{54} & c_{64} \\ c_{51} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{65} \\ c_{61} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{pmatrix} \quad (9.15)$$

Бундай кўринишда тензор ҳеч қандай симметрияга эга бўлмаган муҳитнинг эластиклигини характерлайди. Кристалларда симметриянинг мавжудлиги мустақил модуллар сонини намойишига олиб келади. 9.1-жадвалда турли кристалл гуруҳлари учун мустақил эластиклик модуллари келтирилган. Бунда, албатта, координаталар ўқи кристаллографик ўқларига нисбатан маълум бир танланган йўналишда йўналтирилган деб олинади.

9.1-жадвал

№	Кристалл сингонияси	Симметрия гуруҳи	Мустақил модуллар сони	Эластиклик модули матричаси	Кристалл номи (мисол)
I	II	III	IV	V	VI
1	Триклін	C_1, S_2	21	$c_{11} \ c_{12} \ c_{13} \ c_{14} \ c_{15} \ c_{16}$ $c_{22} \ c_{23} \ c_{24} \ c_{25}$ c_{26} c_{33} $c_{34} \ c_{35} \ c_{36}$ $c_{44} \ c_{45} \ c_{46}$ $c_{55} \ c_{56}$ c_{66}	Мис купороси

9.1- жадвалнинг давоми

I	II	III	IV	V	VI
2	Моноклин	C_2, C_{2h} C_6	13	$c_{11} c_{12} c_{13}$ 0 0 c_{16} c_{22} c_{23} 0 0 c_{26} c_{33} 0 0 c_{36} $c_{44} c_{45}$ 0 c_{55} 0	Гипс
3	Ромбик	$D_2K V$ $C_{2v}KD_{2h}$	9	$c_{11}c_{12}c_{13}$ 0 0 0 c_{22} c_{23} 0 0 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{55} 0 c_{66}	Сегнет тузи
4	Тетрагонал	C_4, C_{4h} C_{4v}	7	$c_{11}c_{12}c_{13}$ 0 0 c_{16} c_{16} c_{13} 0 0 c_{16} c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{55} 0 c_{66}	Шеслит
5	-FF-	$S_4, D_{2d},$ D_4, D_{3h}	6	$c_{11} c_{12} c_{13}$ 0 0 0 c_{11} c_{13} 0 0 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{55} 0 c_{66}	Аммоний Дигидро- фосфати
6	Тригонал	c_3, c_{3i}	7	$c_{11} c_{12} c_{13} c_{14} -c_{25}$ 0 $c_{14} c_{25}$ 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 $-c_{25}$ c_{44} c_{14} $\chi(c_{11}-c_{12})$	Доломит
7	-FF-	$D_3, D_{3v},$ D_{3d}	6	$c_{11} c_{12} c_{13} c_{14}$ 0 0 $c_{11} c_{13} -c_{14}$ 0 0 c_{33} 0 0 0 $c_{44} c_{14}$ $\chi(c_{11} -c_{12})$	α -кварц, турмалин

I	II	III	IV	V	VI
8	Гексагонал	$C_{3h}, D_{3h},$ C_{6v}, D_6 C_{6h}, C_{6v} D_{6h}	5	$c_{11} \ c_{12} \ c_{13} \ 0 \ 0$ 0 $c_{11} \ c_{13} \ 0$ 0 0 0 0 0 $c_{44} \ 0 \ 0$ $c_{44} \ 0$ $X(c_{11} - c_{12})$	β -кварц, кадмий сульфиди
9	Кубик	$T, O, T_h,$ T_d, O_h	3	$c_{11} \ c_{12} \ c_{12} \ 0$ 0 0 $c_{11} \ c_{12}$ 0 0 0 $c_{11} \ 0 \ 0 \ 0$ $c_{44} \ 0 \ 0$ $c_{44} \ 0$ c_{44}	Ишқорий галлоид кристаллар

9.6. Изотроп қаттиқ жисмнинг эластиклик модуллари

Изотроп муҳит учун эластиклик модуллари координаталар ўқиға боғлиқ бўлмайди. Бу эса

$$c_{12} = c_{13} = c_{23}, \quad c_{44} = c_{55} = c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2, \quad c_{11} = c_{22} = c_{33} \quad (9.16)$$

бўлишини таъминлайди. Демак, изотроп қаттиқ жисмларда фақат иккита мустақил эластиклик модуллари мавжуд экан:

$$\lambda = c_{12} = c_{13} = c_{23}, \quad \mu = c_{44} = c_{55} = c_{66}, \quad \text{ва (9.16) га асосан,}$$

$$c_{11} = c_{22} = c_{33} = \lambda + 2\mu$$

Ушбу ифодалардаги λ ва μ катталикларни Ламэ доимийлари деб аталади. Изотроп қаттиқ жисм учун Гук қонуни қуйидагича ёзилади:

$$\sigma_{ik} = \lambda \theta \delta_{ik} + 2\mu \epsilon_{ik}, \quad (i, k=1, 2, 3) \quad (9.17)$$

Бу ерда $\theta = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}$ — ҳажмий кенгайиш коэффициентини, σ_{ik} - Кроннекер символи. Эластиклик модуллари c_{nm} деформацияланиш қандай жараёнда олиб борилганига қараб адиабатик ва изотермик эластиклик модуллариға ажратилади. Масалан, товушнинг тарқалиш жараёнидаги деформацияни адиабатик деформация деб қараш мумкин. Секин ўзгарадиган деформацияларни эса изотермик деформациялар деб олишимиз мумкин.

9.7. Содда деформация ва уларда турли эластиклик модуллари орасидаги боғланиш

Изотроп муҳитдаги содда деформацияларни кўриб чиқамиз. (9.17) ифодага асосан, изотроп муҳит учун Гук қонуни

$$\begin{aligned}
 \sigma_{11} &= (\lambda + 2\mu)\epsilon_{11} + \lambda\epsilon_{22} + \lambda\epsilon_{33} = \lambda\theta + 2\mu\epsilon_{11} \\
 \sigma_{22} &= \lambda\theta + 2\mu\epsilon_{22} \\
 \sigma_{33} &= \lambda\theta + 2\mu\epsilon_{33} \\
 \sigma_{32} &= \sigma_{31} = 2\mu\epsilon_{32} \\
 \sigma_{13} &= \sigma_{31} = 2\mu\epsilon_{13} \\
 \sigma_{12} &= \sigma_{21} = 2\mu\epsilon_{21}
 \end{aligned}
 \tag{9.18}$$

кўринишда ёзилиши мумкин.

Юқоридаги тенгламалардан деформация компонентларини топамиз.

$$\left. \begin{aligned}
 \epsilon_{11} &= \frac{2(\lambda + \mu)\sigma_{11} - \lambda\sigma_{22} - \lambda\sigma_{33}}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}, \\
 \epsilon_{22} &= \frac{-\lambda\sigma_{11} + 2(\lambda + \mu)\sigma_{22} - \lambda\sigma_{33}}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}, \\
 \epsilon_{33} &= \frac{-\lambda\sigma_{11} - \lambda\sigma_{22} + 2(\lambda + \mu)\sigma_{33}}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}
 \end{aligned} \right\}
 \tag{9.19}$$

Ушбу ифодалар бир қанча содда деформацияларни таҳлил қилиш имконини беради.

а) Стерженнинг чўзилишини кўриб чиқайлик. Бунда кучланиш фақат стержен узунаси бўйлаб қўйилади: $\sigma_{11} = \sigma_{xx} = \sigma$, бошқа барча ташқи кучланишлар нолга тенг $i \neq k$ бўлганда $\sigma_{ik} = 0$.

(9.19) тенгламалардан

$$\epsilon_{11} = \frac{(\lambda + \mu)\sigma}{\mu(3\lambda + 2\mu)}; \quad \epsilon_{22} = \epsilon_{33} = -\frac{\lambda\sigma}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}
 \tag{9.20}$$

эқанлигини топамиз. Юқоридаги ифодалардан кўриниб турибдики, агар стержен x — ўқи бўйича чўзилса, y шу ўққа

кўндаланг йўналишларда (yz) ички кучлар таъсирида сиқилар экан ($\epsilon_{22}, \epsilon_{33} < 0$).

ϵ_{11} билан σ орасидаги коэффициент стерженнинг эластиклигини билдирувчи катталиқ бўлиб, унга тесқари катталиқ Юнг модули деб аталади:

$$E = \frac{(3\lambda + 2\mu)\mu}{\lambda + \mu}, \quad (9.21)$$

у ҳолда

$$\epsilon_{11} = \frac{\sigma}{E} \quad (9.22)$$

Шундай қилиб, Юнг модули стерженни чўзишга нисбатан қаттиқлигини билдирувчи коэффициентдир. Сон жиҳатдан Юнг модули деформация бирга тенг бўлгандаги (бунда жисм икки марта узаяди) қучланишга тенгдир.

Стерженнинг кўндаланг деформациясининг бўйлама деформациясига нисбати Пуассон коэффициенти деб аталади.

$$\nu_0 = \left| \frac{\epsilon_{22}}{\epsilon_{11}} \right| = \left| \frac{\epsilon_{33}}{\epsilon_{11}} \right| = \epsilon_{22} \cdot \frac{E}{\sigma} = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \quad (9.23)$$

Турли моддалар учун Пуассон коэффициенти $0.2 \div 0.5$ оралиқда бўлади. Юнг модули ва Пуассон коэффициентлари изотроп муҳитларнинг эластиклик хоссаларини тўлиқ ифодаловчи мустақил катталиқлар ҳисобланади. Ламэ константаларини ҳам ушбу катталиқлар орқали ифодалаш мумкин:

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= \nu_0 E [(1 + \nu_0)(1 - 2\nu_0)]^{-1}, \\ \mu &= E [2(1 + \nu_0)]^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (9.24)$$

Баъзи бир моддаларнинг изотроп ҳолатлари учун E Юнг модули, ν_0 Пуассон коэффициенти ва ν_0 силжиш модуллари G 9.2- жадвалла келтирилган.

б) Бир жинсли чўзилиш.

Энди деформация фақат x — ўқи бўйлаб нолдан фарқли бўлган ҳолатни кўриб чиқамиз. Бунда yz

№	Модланинг номи	$E \cdot 10^{-10} \text{НФм}^2$	ν_0	$G \cdot 10^{-10} \text{НФм}^2$
1	Волфрам	36.0	0.27	13.3
2	Пулат - 3	22+24	0.30	8.5+8.8
3	Темир	21	0.28	8.2
4	Мис	12.0	0.35	4.6
5	Жез	9+10	0.35	3.0+3.7
6	Олтин	8.0	0.41	2.9
7	Алюминий	7.0	0.34	2.6
8	Қалай	5.4	0.33	2.0
9	Кўргошин	1.6	0.44	0.6
10	Кварц	7.4	0.18	3.2
11	Крон ойнаси	7.2	0.25	2.9
12	Флинт ойнаси	5.5	0.23	2.4
13	Чинни	6.0	0.23	2.4
14	Муз	1.0	0.33	0.4
15	Плексиглас	0.5	0.35	0.15

текислик бўйича деформация нолга тенг бўлсин: $\epsilon_{11} \neq 0$, $\epsilon_{22} = \epsilon_{33} = 0$.

Бундай деформацияни чексиз изотроп муҳитда тарқалаётган бўйлама акустик тўлқинлар содир қилади. Гук қонунига асосан, (9.18) ифодалардан

$$\sigma_{11} = (\lambda + 2\mu)\epsilon_{11}, \quad \epsilon_{22} = \epsilon_{33} = \lambda\epsilon_{11} \quad (9.25)$$

Демак, бу ҳолда кўндаланг мусбат кучланиш пайдо бўлади. Эластиклик модули эса

$$c_{11} = \lambda + 2\mu \quad (9.26)$$

ифода билан аниқланади. (9.24) ифодадан фойдаланиб,

$$c_{11} = E[2(1 + \nu_0)(1 - \nu_0)]^{-1} \quad (9.27)$$

эканлигини топамиз. Охирги ифодадан кўриниб турибдики, ν_0 нинг ҳар қандай ҳақиқий қийматида $E < c_{11}$ бўлади. Бунинг физик маъноси шундан иборатки, кўндаланг деформациянинг йўқлиги муҳитнинг x ўқи бўйича чўзилишини қийинлаштиради ва натижада муҳитнинг эффектив қаттиқлиги ошади.

в) Соф силжиш.

Кучланиш тензорини x у текисликда силжима (ёки тангенциал) ташкилловчиси $\sigma_{12} = \sigma_{\tau}$ таъсир қилаётган бўлсин. Қолган барча ташкилловчи нолга тенг. Бу ҳол силжиш деб

аталади. (9.19) ифодалардан фойдаланиб, қуйидагини ҳосил қиламиз:

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \frac{\sigma_{\tau}}{2\mu}. \quad (9.28)$$

Олдин айтиб ўтганимиздек, деформация тензорининг ε_{12} компонентаси зу текисликдаги силжиш бурчагининг ярмига тенг: $\varepsilon_{12} = \frac{\varphi_{12}}{2}$. Тулиқ силжиш бурчаги эса

$$\varphi = \frac{\sigma_{\tau}}{\mu} = \frac{\sigma_{\tau}}{G} \quad (9.29)$$

Шундай қилиб, μ силжиш модули G га тенг ва у тангенциал куч таъсирида жисмнинг силжиш бурчагига тенг. Бу модулниң Юнг модули ва Пуассон коэффициенти билан боғланиши (9.24) ифодада келтирилган.

Ушбу ифодадан силжиш модули Юнг модулидан 2.5+3 марта кичик бўлиши келиб чиқади.

г) Ҳар томонлама сиқилиш.

Куб шаклидаги кичик ҳажмни танлаб оламиз, унинг ёқлари x , y , z ўқларига параллел йўналган бўлсин. Кубнинг ҳамма ёқларига кубнинг марказига йўналган (яъни манфий) ўзаро тенг кучланиш таъсир қилсин. У ҳолда

$$-\sigma_{11} = -\sigma_{22} = -\sigma_{33} = p \quad (9.30)$$

бўлади. Тангенциал кучларни нолга тенг деб оламиз. (9.18) ифода қуйидаги кўринишга келади:

$$\begin{aligned} -p &= \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_{11}, \\ -p &= \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_{22}, \\ -p &= \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_{33}, \\ \varepsilon_{12} &= \varepsilon_{23} = \varepsilon_{13} = 0. \end{aligned} \quad (9.31)$$

Юқоридаги учала тенгламани қўшиб,

$$p = -\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\theta \quad (9.32)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Охириги ифода ҳар томонлама сиқилиш учун Гук қонуни деб аталади.

$$K = \lambda + \left(\frac{2}{3}\right)\mu \quad (9.33)$$

катталикни ҳар томонлама сиқиш коэффиценти деб аталади. (9.24) ифодалардан фойдаланиб, ушбу коэффицентни Юнг модули ва Пуассон коэффиценти орқали ифодалаш мумкин:

$$K = E[3(1-2\nu_0)]^{-1} \quad (9.34)$$

Ушбу ифодадан сиқилмайдиган муҳит учун ($k=\infty$) Пуассон коэффиценти $\nu_0=0,5$ эканлиги келиб чиқади. (9.26) ва (9.33) ифодаларни таққослаб, c_{11} ва K лар орасидаги боғланишни топиш мумкин:

$$c_{11} = K + \left(\frac{4}{3}\right)\mu. \quad (9.35)$$

Ҳар томонлама сиқилиш натижасида жисм зичлиги $\Delta\rho$ қадар ўзгарса, унинг нисбий сиқилиш коэффиценти

$$s = \frac{\Delta\rho}{\rho_0} \quad (9.36)$$

ифода билан аниқланади. Гук қонунидан келиб чиққан ҳолда ушбу катталикни ρ ва K лар орқали ифодалаш мумкин:

$$s = \frac{P}{K}. \quad (9.37)$$

Силжиш модули $G=0$ бўлган муҳитлар ҳам мавжуд. Бундай муҳитларга идеал оқувчанликка эга бўлган суюқлик ёки газлар киради. Уларнинг эластиклиги фақат битта Ламэ доимийси орқали аниқланади. Бундай муҳитнинг ҳар бир ажратилган юзасига нормал йўналган кучланиш таъсир қилади.

9.8. Кичик деформациялар энергияси

Кичик деформацияланган жисмнинг деформация натижасида олган энергиясини топамиз. Деформация натижасида силжиш вектори u кичик du қийматга ўзгарсин. Бунда бажарилган элементар иш ички кучларнинг du га қўпайтмасига тенг.

Ички кучни $F_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$ га тенглигидан

$$dA = \int_V \left(\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \right) (du_i) dV. \quad (9.38)$$

Бўлаклаб интеграллаганимизда (9.38) ифода қўйидаги кўринишга келади:

$$dA = \int \sigma_{ik} (du_i) dS - \int_V \sigma_{ik} \frac{\partial}{\partial x_k} (du_i) dV. \quad (9.39)$$

Деформацияланган катта муҳит учун биринчи интеграл нолга тенг бўлади. Чунки, муҳит юзасида $\sigma_{ik}=0$. Иккинчи интегралда $\left(\frac{\partial}{\partial x_k} \right) (du_i) = d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)$ эканлигини ҳисобга олиб,

$$dA = - \int_V \sigma_{ik} d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) dV \quad (9.40)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Интеграл остидаги ифода бирлик ҳажмдаги ички кучлар бажарган ишни ифодалайди:

$$A' = - \sigma_{ik} d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (9.41)$$

Чизиқий деформация учун σ_{ik} тензорнинг симметрик бўлишлигидан фойдаланиб, қўйидаги

$$\sigma_{ik} d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) = \sigma_{ik} d \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \right] = \sigma_{ik} d \epsilon_{ik} \quad (9.42)$$

ифодага келамиз. Унда ҳажм бирлигидаги элементар иш учун

$$dA' = - \sigma_{ik} d \epsilon_{ik} \quad (9.43)$$

ифодани ҳосил қиламиз.

Қайтарувчи адиабатик деформацияланиш жараёнлари учун бу иш тесқари ифода билан олинган ички энергиянинг ўзгаришига тенг:

$$dU = -dA' = \sigma_{ik} d \epsilon_{ik} \quad (9.44)$$

Умумлашган Гук қонунидан фойдаланиб, қўйидаги

$$dU = c_{ijkl} \epsilon_{ik} d \epsilon_{jk} \quad (9.45)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Уни интегралласак, эластик деформацияланган жисмнинг потенциал энергияси учун

$$U = \frac{c_{ijkl} \varepsilon_{ik} \varepsilon_{jl}}{2} \quad (9.46)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Изотроп муҳит учун (9.46) ифода бир қанча содда кўринишга келади.

$$U = \frac{\lambda \theta^2}{2} + \mu \varepsilon_{ik}^2 \quad (9.47)$$

Охириги ифодани (деформация бўйича) дифференциаллаганимизда (9.17) ифодани ҳосил қиламиз.

9.9 Тензоқаршилик ҳодисаси

Ўтказгич электрик қаршилигининг механик деформация таъсирида ўзгаришини тензоқаршилик ҳодисаси деб аталади. Бу ҳодиса айниқса ярим ўтказгичларда яққол намоён бўлади. Деформация натижасида ярим ўтказгичларда заряд ташувчиларнинг энергетик спектри, эффектив массаси, тақиқланган зона кенглиги ва бошқа бир қатор катталиклар ўзагаради. Бу эса ярим ўтказгичнинг электрик қаршилиги ўзгаришига олиб келади. Бу ҳодисани баҳолаш учун махсус катталиклар киритилган.

$$\rho_e = \frac{\rho_{00}^{II} - \rho_0^{II}}{(-p)\rho_0^{II}} \quad (9.48)$$

нисбат билан аниқланадиган катталик — тензоқаршиликнинг бўйлама коэффициенти ёки кучланиш бўйича тензосезгирлик дейилади. Бунда ρ_0^{II} , деформация йўқлигидаги солиштирма қаршилик.

Деформация бўйича тензосезгирлик коэффициенти дейилган.

$$S = P \cdot E \quad (9.49)$$

катталик киритишимиз ҳам мумкин, бунда E — Юнг модули. Ярим ўтказгичларнинг тензосезгирлиги металларникидан ўн — юз марта ортиқ. Масалан, $\rho_0 = 0,1$ Ом.см солиштирма қаршиликли p — тур кремний учун S тахминан 125 га тенг ва металл сим тензометрларникидан 60 марта ортиқ.

Ҳозирги замон фани ва техникасида тензоқаршилик ҳодисаси асосида тайёрланган кўпгина самарали тензометрлар

жуда кичик деформацияларни ўлчашда, силжиш, моментлар, кучлар, босимларнинг сезгир ўлчагичлари сифатида, нисбатан катта деформацияларни ўлчашда ва бошқа мақсадларда кенг қўлланилмоқда.

Саволлар ва масалалар

1. Деформация деганда нимани тушунасиз?
2. Деформацияларнинг қандай турлари бор?
3. Кичик деформациялар учун Гук қонуни қандай кўринишда бўлади?
4. Ламэ доимийлари нима?
5. Пуассон ва Ламэ доимийлари қандай боғланган?
6. Изотроп олтин учун Ламэ доимийларини аниқланг. E ва ν_0 қийматлари 9.2 – жадвалда келтирилган.
7. Бир ўлчовли деформация учун c_{11} топилсин ($\epsilon_{11} \neq 0$, қолган барча $\epsilon_{ik} = 0$), $\nu_0 = 0,35$, $\mu = 3,5$.
8. 9.2-жадвалдан фойдаланиб изотроп алюминий учун ҳар томонлама сиқилиш коэффиценти K топилсин.

Х БОБ

МЕТАЛЛАР

Қадимдан металлар инсонлар ҳаётида муҳим ўрин тутган. Фан ва техника ривожланишини металларсиз тасаввур қилиш қийин. Табиатда металлар миқдор жиҳатдан кўп бўлмасада, уларнинг турлари кўп учрайди. Элементлар даврий жадвалидаги бизга маълум 107 та кимёвий элементдан 83 таси металлар ҳисобланади. Металл сўзи юнонча «metallon» сўзидан келиб чиққан бўлиб шахта, *руда*, найза каби маъноларни англатади.

Металлар электр токини ва иссиқликни яхши ўтказади, электромагнит тўлқинларни яхши қайтаради. Уларнинг механик хоссаларида бошқа қаттиқ jismlарга нисбатан бир қанча афзалликлар бор. Металларнинг бу хоссалари, уларнинг молекула (ёки атом) лари орасидаги боғланиш табиатидан, уларнинг кристалл панжараси ва энергетик зоналари тузилишидан келиб чиқади. Кўп ҳолларда металлар ҳажмий ёки марказлашган кубик ва гексагонал тузилишга эга бўлган, молекула (ёки атом)лари зич жойлашган кристалл панжараси ҳосил қиладилар.

Металларнинг юқорида келтирилган ажойиб хоссалари олимларни ўзига жалб қилади. Металларни физик хоссаларини тушунтириб берувчи назариялар ва моделлар яратиш XIX—аср охирига XX — аср бошидан бошланган. Ҳозирги кунда мумтоз моделларнинг кўпчилиги талабга жавоб бермаса-да, баъзи моделлардан ҳозирда ҳам фойдаланиб келинмоқда. Шунинг учун ҳам биз даставвал яратилган металлар назарияларини қисқача кўриб ўтамиз.

10.1. Металларнинг электрик хоссалари

Металлар электрик токини яхши ўтказувчи моддалардир. Металл ўтказгичдан ўтаётган токнинг зичлиги унга қўйилган электр майдон кучланганлигига тўғри пропорционал:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (10.1)$$

Бу ифода Ом қонуни деб номланади. Пропорционаллик коэффициентини σ солиштирма электр ўтказувчанлик, унга тесқари

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (10.2)$$

катталиқ эса солиштирма электр қаршилиқ дейилади. Металларнинг солиштирма қаршилиғи $10^{-8} \div 10^{-6}$ Ом-м оралигида қийматларга эга. Металларнинг электр ўтказувчанлигини тушунтириб берувчи моделлардан биринчисини Друде ишлаб чиқди.

10.1.1 Друде модели

Инглиз физиги Ж. Ж. Томсон 1897 йили электронни кашф этди. Бу кашфиёт моддаларнинг турли хоссаларини тушунтириш учун катта туртки бўлди. Орадан уч йил ўтгач, Друде ўзининг электр ва иссиқлик ўтказишнинг классик(мумтоз) назариясини ишлаб чиқади. Ушбу назарияга асосан металларни эркин электронлар газига ботирилган ионлардан иборат деб тасаввур қилинади. Ундан ташқари, назария яна қуйидаги фазрларга асосланган.

а) Электронлар кристалл бўйлаб эркин кўчиб юра олади. Улар ўз ҳаракатлари давомида кристалл панжараси тугунларидаги ионлар билан тўқнашадилар.

Электроннинг бир-бири билан тўқнашувлари ҳисобга олинмайди. Икки тўқнашув орасида электрон Ньютон қонунига асосан тўғри чизиқ бўйлаб ҳаракат қилади;

б) Электронларнинг металл ионлари билан тўқнашуви оддий зарядсиз шарчалар тўқнашувидек содир бўлади;

в) Электроннинг икки кетма-кет тўқнашувлар орасидаги ҳаракати ўртача вақти $\bar{\tau}$ киритилган ва уни электроннинг ўртача эркин югуриш вақти деб номланади. Электроннинг вақт бирлигидаги тўқнашувлар эҳтимоллиғи $1/\bar{\tau}$ га тенг деб олинган;

г) Электронлар гази тўқнашувлар туфайли термодинамик мувозанатга келади. Уларнинг тўқнашишидан олдинги ва кейинги тезликлари ўзаро боғлиқ эмас.

Металлдаги ҳамма электронлар бир хил ўртача тезликка эга бўлиб, уларни бир атомли идеал газдек тасаввур қилинган.

Металл ўтказгич учларига электр кучланиш қўйилмаганда ундаги эркин электронлар тартибсиз иссиқлик ҳаракатида бўлади. Классик(мумтоз) физиканинг энергияни эркинлик даражалари бўйича тенг тақсимот қонунига асосан, ҳар бир электронга тўғри келувчи ўртача кинетик энергия $3/2 kT$ га тенг. Бундан ўртача тезликни топишимиз мумкин:

$$\frac{m \bar{u}^2}{2} = \frac{3}{2} kT \quad (10.3)$$

ва

$$|\bar{u}|_T = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (10.4)$$

ҳажм бирлигидаги электронлар сони n га тенг бўлсин, унда электронларнинг ҳажм бирлигидаги кинетик энергияси

$$W_k = \frac{3}{2} nkT \quad (10.5)$$

бўлади. Металлга электр майдон қўйилганда ундаги эркин электронларнинг тартибсиз иссиқлик ҳаракатига майдоннинг таъсир кучи йўналишида тартибли ҳаракат қўшилади. Электронлар гуруҳининг бир томонга қараб силжиши кузатилади. Электронларнинг ташқи электр майдон таъсиридаги бундай ҳаракати **дрейф ҳаракати** ва ҳаракат тезлиги **дрейф тезлик** деб аталади. Ташқи майдон электронга $-e E$ куч билан таъсир қилади, бу куч таъсирида электрон

$$a = \frac{-eE}{m} \quad (10.6)$$

тезланиш олади. Электроннинг ионлар билан икки кетма-кет тўқнашишлари орасида олган ўртача дрейф тезлиги

$$\bar{v} = a\bar{t} = \frac{-eE\bar{t}}{m}, \quad (10.7)$$

бунда $-e$ — электроннинг заряди, m — унинг массаси.

Маълумки, металл ўтказгичдаги ток зичлигини қуйидагича ёзишимиз мумкин:

$$J = -nev \quad (10.8)$$

Бу ерда n — бирлик ҳажмдаги электронлар сони. У ҳолда (10.7) ва (10.8) муносабатдан фойдаланиб,

$$j = nk \frac{2\bar{\tau}}{m} E \quad (10.9)$$

ифодани ҳосил қиламиз. (10.9) ни (10.1) билан таққослаб металлнинг

$$\sigma = \frac{ne^2\bar{\tau}}{m} \quad (10.10)$$

электр ўтказувчанлигини топамиз. Ушбу ифода ёрдамида металлнинг солиштирма қаршилиги ρ ни билган ҳолда $\bar{\tau}$ ни аниқлашимиз мумкин:

$$\bar{\tau} = \frac{\sigma m}{ne^2} = \frac{m}{n\rho e^2}. \quad (10.11)$$

ρ — нинг хона температурасидаги қийматини олиб, $\bar{\tau}$ ни ҳисоблаганимизда $\bar{\tau} = 10^{-14} \div 10^{-15}$ с бўлади. Электроннинг дрейф тезлиги унинг иссиқлик тезлигидан анча кичиклиги учун $\bar{\tau}$ ни эркин югуриш масофаси $\bar{\ell}$ орқали қуйидагича ёзиб олишимиз мумкин:

$$\bar{\tau} = \bar{\ell} / \bar{u}_T. \quad (10.12)$$

Охири муносабатдан $\bar{\tau}$ ни билган ҳолда ва хона температураси учун (10.4) дан \bar{u}_T ни ҳисоблаб ($\bar{u}_T \cong 10^7$ м/с бўлади),

металлдаги эркин электронлар учун $\bar{\ell} = (1 \div 10) \text{Å}$ бўлишини аниқлаймиз. Кристалл панжараси ионлари орасидаги масофа ҳам ана шу тартибда бўлишини эътиборга олсак, Друде модели жуда яхши натижага олиб келишига ишонч ҳосил қиламиз. Бироқ паст температураларда назария билан тажриба натижалари бир-биридан узоқлашиб кетади. Тажриба паст температураларда $\bar{\ell} \sim 10^3 \text{Å}$ гача ва ҳатто тоза намуналарда $10^8 \text{Å} = 1 \text{см}$ бўлишини кўрсатади.

Бу ҳолни Друде назарияси ёрдамида тушунтириш қийин. Энди $\bar{\tau}$ нинг температурага боглиқлигини кўрамиз. (10.4) ва (10.12)лардан

$$\bar{\tau} = \bar{\ell} \sqrt{\frac{m}{3kT}}, \quad (10.13)$$

уни (10.10) га қўйсак, қуйидаги натижага келамиз:

$$\sigma = ne^2 \tau \sqrt{\frac{1}{3kTm}} \quad (10.14)$$

Кўриниб турибдики, Друде моделида ўтказувчанлик $\sigma \sim T^{-\frac{1}{2}}$ экан. Тажрибалар эса σ нинг T^{-1} га пропорционаллигини кўрсатади. Бу ҳам металлларнинг ушбу модели қийинчиликларидан биридир.

Друде назариясининг яна бир ютуғи уни Видеман — Франц қонуни учун тўғри натижага олиб келишидир. Тажриба усули билан 1853 йилда аниқланган Видеман-Франц қонунига кўра, металлларнинг иссиқлик ўтказувчанлик коэффициенти уларнинг электр ўтказувчанлигига нисбати маълум бир температурада барча металллар учун бир хил қийматга эгадир, яъни

$$\kappa / \sigma = LT \quad (10.15)$$

Бунда L ўзгармас сон бўлиб, уни Лоренц сони деб ҳам аталади. Ушбу қонунни текшириб кўриш учун Друде назариясига асосланиб Лоренц сонини келтириб чиқарамиз. Бизга σ нинг кўриниши маълум. Демак, металлнинг иссиқлик ўтказувчанлигини топишимиз керак. Таърифга кўра, иссиқлик ўтказувчанлик бирор жисмдаги иссиқлик оқими зичлиги билан температура градиенти орасидаги боғланиш коэффициенти-тидир.

$$q = -\kappa \nabla T \quad (10.16)$$

Бунда q - иссиқлик оқими зичлиги, яъни вақт бирлигида бирлик юздан ўтаётган иссиқлик миқдори,

$$\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \bar{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \bar{k} = \text{grad} T \quad (10.17)$$

эса температура градиентидир.

κ ни топиш учун учларида донмий температуралар фарқи мавжуд бўлган металл стерженни кўриб чиқайлик. X — ўқини стержен узунаси бўйлаб йўналтирамиз. Бундай стационар бир ўлчовли ҳол учун (10.16) ифода

$$q = -\kappa \frac{dT}{dx} \quad (10.18)$$

қўринишга келади. Стерженнинг турли нуқталарида температура турлича бўлгани учун электроннинг ўрғача иссиқлик энергияси координата ва температурага боғлиқ бўлади $E=E(x, T)$. Стерженнинг бир учидан x масофада жойлашган кесими орқали ўтаётган иссиқлик оқимини ҳисоблаймиз. Бу иссиқлик оқими вақт бирлигида кесимнинг чап томонидан ўнг томонига ўтаётган электронлар энергияси билан ўнг томондан чап томонга ўтаётган электронлар энергияси фарқига тенг бўлади. Ток йўқлиги назарда тутилгани учун электронлар сони, албатта тенг бўлиши керак. У ҳолда иссиқлик оқими зичлиги учун

$$q = -C_v \Delta T \Delta V / \Delta t \quad (10.19)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бунда C_v — ҳажм ўзгармас бўлгандаги металнинг иссиқлик сизими, ΔT — стерженнинг Δx га тенг бўлган масофадаги икки нуқтаси орасидаги температуралар фарқи ва ΔV стерженнинг узунлиги Δx бўлгандаги ҳажми. Δx ни нолга яқинлаштириб ($\Delta x \rightarrow 0$), x нуқтадаги кесмадан ўтаётган оқимни топамиз:

$$q = C_v \left(-\frac{dT}{dx} \right) \frac{dx}{dt} dx = -C_v v_x \frac{dT}{dx} dx \quad (10.20)$$

Эркин югуриш масофаси кичик бўлган ҳолларда $dx = v_x \bar{\tau}$ деб олишимиз мумкин. Унда

$$q = -C_v v_x^2 \bar{\tau} \frac{dT}{dx} \quad (10.21)$$

Бир ўлчовли ҳолдан уч ўлчовлик ҳолга ўтамиз. Бу ҳолда

$$v_x^2 = \frac{1}{3} v^2 \quad (10.22)$$

ва dT/dx ўрнига ∇T ёзилади. Натижада

$$q = -\frac{1}{3} C_v v_T^2 \bar{\tau} \nabla T \quad (10.23)$$

муносабатни ҳосил қиламиз. Уни (10.16) билан таққослаб иссиқлик ўтказувчанлик учун

$$\kappa = \frac{1}{3} C_v v_T^2 \bar{\tau} = \frac{1}{3} C_v v_T \bar{v} \quad (10.24)$$

ифодага эга бўламиз. Бу муносабат металллардаги эркин электронларнинг иссиқлик ўтказувчанлик коэффициентидир. Энди Лоренц сонини топишимиз мумкин.

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{C_v m v_T^2}{n e^2} \quad (10.25)$$

(10.5) ифодадан C_v ни топамиз,

$$C_v = \left(\frac{\partial W_k}{\partial T} \right)_v = \frac{3}{2} k n \quad (10.26)$$

ва (10.3) ни ҳисобга олган ҳолда,

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{k}{e} \right)^2 T \quad (10.27)$$

ни ҳосил қиламиз. У ҳолда Лоренц сони учун

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{3}{2} \left(\frac{k}{e} \right)^2 \quad (10.28)$$

қиймат келиб чиқади. Уни ҳисобласак, $L = 1.11 \cdot 10^{-8}$ Вт·Ом/Кл² бўлади. Бу қиймат тажрибадаги натижадан икки марта кам. Шунга қарамай ушбу натижа Друде модели ютуқларидан ҳисобланади, чунки у Лоренц сони металлларнинг турига боғлиқ эмаслигини тасдиқлайди.

10.1.2. Металларда Холл ҳодисаси

Металл ўтказгични ундаги оқётган ток йўналишига кўндаланг йўналган магнит майдонга жойлаштирсак ўтказгичнинг ён томонларида потенциаллар фарқи пайдо бўлади (10.1- чизма). Бу ҳодиса Холл ҳодисаси деб номланади. Маълумки, магнит майдонда ҳаракатланаётган зарядли заррага Лоренц кучи таъсир этади:

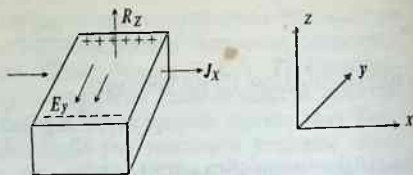
$$\vec{F}_H = \frac{q}{c} [\vec{v} \vec{H}]. \quad (10.29)$$

Бунда \vec{v} — зарра тезлиги, \vec{H} — магнит майдон кучланганлиги, q — зарра заряди.

Металл ўтказгичдаги эркин электронларга

$$\vec{F} = -\frac{e}{c} [\vec{v} \vec{H}] \quad (10.30)$$

куч таъсир этади ва бу куч 10.1- чизмадаги ҳол учун $y - \bar{y}$ қи буйлаб йўналган. Натижада намунанинг $y - \bar{y}$ қиға кўндаланг ёқларида потенциаллар фарқи вужудга келади. Ҳосил бўлган электр майдон кучланганлиги ўтказгич-даги ток зичлиги ва ташқи магнит майдон кучланганлигига пропорционал бўлади:



10.1-чизма. Холл ҳодисасига оид.

$$\vec{E} = R_H [\vec{j} \vec{H}]. \quad (10.31)$$

Бу ифодадаги R_H – Холл коэффициентини деб аталади. Друде моделига асосланган ҳолда Холл коэффициентини учун

$$R_H = -\frac{1}{en} \quad (10.32)$$

ифода олинган. Бу нагигага кўра, R_H нинг фақат металллардаги заряд ташувчилар зичлигига боғлиқлиги келиб чиқади.

Кўп металллар учун паст температура ва кучли магнит майдонда (10.32) ифода тажриба билан мос келувчи натижалар беради. Аммо, бошқа ҳолларда температура ва магнит майдон кучланганлигига боғлиқ экан. Холл коэффициентини билган ҳолда паст температуралар учун металллардаги заряд ташувчилар зичлигини ҳисоблаб топишимиз мумкин.

10.1.3. Металларнинг Лоренц модели

Металларнинг классик моделларидан яна бири 1905 йилда эълон қилинган Г. А. Лоренц моделидир.

Ушбу модел Друде моделидан асосан қуйидагилар билан фарқ қилади:

- металлдаги эркин электронлар тезликлари Максвел тақсимотиға (2 бобға қ.) бўйсунди деб олинади;
- электронларнинг дрейф ҳаракатини ифодалашда Болцманнинг кинетик тенгламасидан фойдаланилади.

Энди бу моделга асосланиб металлларнинг электр хоссаларини кўриб чиқамиз. Ташқи энергетик майдон йўқлигида

электронларнинг тезликлар бўйича Максвелл тақсимоги функциясини

$$f dV_x dV_y dV_z = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{-m(V_x^2 + V_y^2 + V_z^2)}{2k_B T} \right] dV_x dV_y dV_z \quad (10.33)$$

кўринишда ёзиб оламиз. Болцман тенгламасини соддалаштириш учун металлни изотроп деб ҳисоблаймиз. Бундай ҳолда электронларнинг тақсимот функцияси f_0 ҳам йўналишга (яъни координаталарга) боғлиқ бўлмайди. Металлга бир жинсли \vec{E} электр майдон қўямиз. Электронларнинг тартибсиз иссиқлик ҳаракати тезликларига бир томонга йўналган дрейф тезлик қўшилади, натижада f ҳам ўзгаради. Электр майдон қўйилгандан кейинги тақсимот функцияси f нинг вақт бўйича ҳосиласини оламиз:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_T \quad (10.34)$$

Биринчи қўшилувчи f нинг электр майдон таъсирида ўзгаришини, иккинчиси эса f нинг электронларнинг ионлар билан тўқнашиши ҳисобига ўзгаришини билдиради. f нинг координаталарга боғлиқлигини ҳисобга олмаймиз. Биринчи қўшилувчинини бошқачароқ кўринишга келтиришимиз мумкин:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M = \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) \left(\frac{\partial f_0}{\partial v} \right) = \left(\frac{-e\vec{E}}{m} \right) \cdot \left(\frac{\partial f_0}{\partial v} \right) \quad (10.35)$$

чунки $\vec{v} = \vec{a}t = \frac{-e\vec{E}}{m}t$, $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_T$ ҳосилани $\frac{\partial f_0}{\partial v}$ билан алмаштирилади. Сабаби: $f_0 = f$.

Тезликнинг тўқнашишлар ҳисобига ўзгаришини электронларнинг электр майдондаги тезланиши мувозанатлайди. Шунинг учун Лоренц $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_T$ катталигини $(f - f_0)$ га тўғри пропорционал бўлади деб тахмин қилади:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_T = \frac{f_0 - f}{\tau_r} \quad (10.36)$$

бунда τ_r — релаксация вақти деб аталади. Ушбу ифодалардан электр майдонда ҳаракатланаётган эркин электронлар учун Болцман кинетик тенгламасини ҳосил қиламиз:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{e\bar{E}}{m} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \bar{V}} \right) + \frac{f - f_0}{\tau_r} = 0. \quad (10.37)$$

Электр майдон таъсирида f_0 дрейф тезлиги йўналиши бўйича бир оз силжийди ва умуман олганда шакли ҳам бир оз ўзгаради, яъни деформацияланади. Лоренц кичик электр майдонлар учун f_0 нинг силжиши ўртача квадрат $V_{кв}$ тезликка нисбатан анча кичик бўлишини кўрсатади. Шунинг учун f_0 нинг деформациясини ҳам ҳисобга олмаса ҳам бўлади, яъни электр майдон таъсирида ўзгармайди деб ҳисобланади.

Металлга қўйилган доимий электр майдон τ_r га нисбатан узоқ вақт таъсир этса стационар ҳолат қарор топади. Мувозанатий ҳолатда тақсимот функцияси вақтга боғлиқ бўлмайди (ўзгармайди):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0. \quad (10.38)$$

У ҳолда (10.37) дан фойдаланиб стационар ҳолат учун

$$f = f_0 + \left(\frac{\tau_r e \bar{E}}{m} \right) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \bar{V}} \right) \quad (10.39)$$

ифода оламиз. Энди f металлдан доимий ток оқаётгандаги электронларнинг тезликлар бўйича тақсимотини билдиради. Майдон x — ўқи бўйича йўналган деб олсак, ток зичлиги учун қуйидагини ёзишимиз мумкин:

$$J_x = - \int e V_x f dV_x dV_y dV_z \quad (10.40)$$

Бунда f нинг ўрнига (10.39) ни қўйсак,

$$J_x = - \int [e V_x f_0 dV_x dV_y dV_z] - \int e V_x \frac{e E \tau_r}{m} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \bar{V}} \right) dV_x dV_y dV_z =$$

Ушбу ифоданинг биринчи қўшилувчиси нолга тенг. Демак,

$$J_x = - \int \frac{e^2 \tau_r E}{m} V_x \left(\frac{\partial f_0}{\partial \bar{V}} \right) dV_x dV_y dV_z \quad (10.41)$$

(10.1) билан (10.41) ни таққосласак,

$$\sigma = -\int \frac{e^2 \tau_r V_x}{m} \frac{\partial f_0}{\partial V} dV_x dV_y dV_z. \quad (10.42)$$

Релаксация вақтини эркин югуриш масофаси \bar{l} ва ўртача квадрат тезлик V орқали ифодалаймиз:

$$\tau_r = \frac{\bar{l}}{V}.$$

$V_x = \frac{1}{3} V$ эканлигини ҳисобга олсак,

$$\sigma = -\int \frac{e^2 \bar{l}}{3m} \frac{\partial f_0}{\partial V} dV_x dV_y dV_z. \quad (10.43)$$

Бундаги $dV_x dV_y dV_z$ ning урнига тезликлар фазосидаги dV қалинликдаги сферик қатлам ҳажмини қўйишимиз мумкин. Сферик қатлам ҳажми $4\pi l^2 dV$ га тенг бўлади. Унда

$$\sigma = \frac{4\pi e^2}{3m} \int_0^\infty \bar{l} V^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial V} \right) dV. \quad (10.44)$$

Ушбу интегрални ҳисоблаб,

$$\sigma = \frac{4\pi e^2 \bar{l}}{3(2\pi m k T)^{3/2}} \quad (10.45)$$

натигага эришамиз. Бу ифода Друде моделидаги σ дан $\sqrt{\frac{3\pi}{8}} = 1.09$ кўпайтувчи билан фарқ қилади. Кўриниб турибдики,

Лоренц модели асосида металлларнинг электр ўказувчанлиги учун ҳосил қилинган натижамиз, олдинги Друде назариясиники билан деярли бир хил экан.

Лоренц моделига асосланиб металлларнинг иссиқлик ўтказувчанлигини ҳисоблаганимизда,

$$\kappa = \frac{1}{9} C_v \bar{V} T, \quad (10.46)$$

яъни Друде натижасидан уч марта кичик муносабатга келамиз. Мос ҳолда Лоренц сони ҳам уч марта кичик бўлади. Лоренц моделига асосланиб Холл коэффициентини топсак,

$$R_H = -\left(\frac{3\pi}{8\pi e}\right). \quad (10.47)$$

Натижалар шунин кўрсатадики, бу юқорида баён қилинган икки классик(мумтоз) назариялар металлларнинг электр ва иссиқлик ўтказувчанликлари, Холл коэффициентини учун деярли бир хил натижаларга олиб келади. Классик(мумтоз) назариялар асосида Видеман-Франц қонуни, паст температуралардаги ўтказувчанлик ва баъзи қонуниятлар ва катталар учун тўғри ифодалар ҳосил қилинади. Лекин, бу назариялар металлларнинг иссиқлик сифимини, юқори магнитик сингдирувчанлигини, мусбат Холл коэффициентларини ва бошқа кўп ҳодисаларни тушунтира олмас эди. Квант механикаси пайдо бўлиши билан қаттиқ жисмлардаги тажрибада кузатиладиган жуда кўп ҳодисалар ўзининг тўғри талқинини топди. Қаттиқ жисмларнинг квант назариясига асосланган янги моделлари пайдо бўла бошлади.

10.1.4. Металлларнинг Зоммерфелд модели

Зоммерфелд моделининг классик(мумтоз) моделлардан асосан иккита фарқи бор.

Зоммерфелд металлдаги электронларнинг тезликларини буйича тақсимотини Ферми-Дирак статистикаси таърифлайди деб олади (II бобга қаранг).

Зоммерфелд металллардаги эркин электронлар учун Паули принципи бажарилишини кўрсатади. Паули принципига асосан ҳар бир энергетик сатҳда энергиялари тенг, лекин спинлари қарама-қарши йўналган иккитадан ортиқ электронлар жойлаша олмайди.

Зоммерфелд назариясида электр ўтказувчанлик учун куйидаги ифода ҳосил қилинади:

$$\sigma = -\frac{4\pi e^2}{3m} \int_0^\infty v^2 \left(\frac{\partial f_0}{\partial v}\right) dv = \frac{-8\pi e^2}{3m^2} \int_0^\infty \bar{v} E \left(\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE. \quad (10.48)$$

Бунда тақсимот функцияси f_0 ни Ферми-Дирак тақсимоти

$$f_0(\epsilon) = \frac{2(m/h)}{\exp\left(\frac{m^2 v^2 - 2E_F}{2kT}\right) + 1} = 2(m/h)^3 f(E) \quad (10.49)$$

кўринишда оламиз. Бундаги E_F ни Ферми энергияси деб аталади.

$f(E)$ эса E — энергияли сатҳнинг электронлар билан тўлганлиги эҳтимоллигини билдирувчи функциядир (II бобга қаранг):

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} \quad (10.50)$$

(10.49)ни (10.48) га қўямиз ва $V(E_F) = \sqrt{\frac{2E_F}{m}}$ дан фойдаланиб,

$$\sigma = \frac{-2e^2 m}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \bar{I} E \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE = \frac{-ne^2}{mV^2(E_F)} \int_0^\infty \lambda E \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE \quad (10.51)$$

муносабатни оламиз. Бундаги

$$\int_0^\infty \frac{\bar{I} E}{E_F} \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE = \bar{I}(E_F) \quad (10.52)$$

катталиқ энергияси E га тенг бўлган электроннинг ўртача эркин югуриш масофасини билдиради. Унда электр ўтказувчанлик учун

$$\sigma = \frac{ne^2 \bar{I}(E_F)}{mV(E_F)} \quad (10.53)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Зоммерфелд назариясига асосан электр ўтказувчанликда ҳамма электронлар қатнашмайди, унда фақат Ферми сатҳи яқинидаги электронларгина қатнаша оладилар. Электроннинг тезлиги ҳам энди иссиқлик ҳаракати тезлиги эмас, балки Ферми сатҳидаги электрон тезлиги олинади. Ўртача эркин югириш вақтини киритамиз:

$$\tau_m = \bar{I}(E_F) / V(E_F). \quad (10.54)$$

Унда электр ўтказувчанлик

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_m}{m} \quad (10.55)$$

Кўринишдан бу ифода олдингиларига ўхшасада, лекин бутунлай бошқа қиймагга тенг бўлган катталиқдир. τ_m Ферми

сатҳидаги электронларнинг икки кетма-кет тўқнашишлар орасидаги ўртача эркин югуриш вақтидир. Зоммерфелд электр тоқ, ўтказишда қатнашувчи электронлар сони Друде моделидаги эркин электронлар сонидан анча кичик эканлигини кўрсатиб этди. Ушбу назарияда Лоренц сони учун

$$L = \kappa / \sigma T = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 = 2,44 \cdot 10^{-8} \text{ Вм Ом / К}^2 \quad (10.56)$$

қиймат олинди. Бу тажрибадаги натижалар билан мос келади.

Холл коэффициентни учун эса қуйидаги муносабатга келамиз.

$$R_H = -\frac{1}{ne}, \quad (10.57)$$

n энергияси E_F га тенг бўлган электронларнинг зичлиги. Зоммерфелд назарияси металлларнинг физик хоссаларини тушунтириб беришда яна бир янги қадам бўлди. Унда электронларнинг тезликлари ва энергиялар бўйича тақсимоти учун биринчи марта Ферми-Дирак тақсимоти қўлланди. Классик (мумтоз) моделлардаги эркин электронлар газини тушунчаси ўрнига ўтказувчанликда қатнашувчи электронлар тушунчаси қўллана бошланди.

Кейинроқ яратилган зоналар назарияси Зоммерфелднинг қўлгина худосалари тўғри эканлигини тасдиқлади.

10.2. Металларда иссиқлик ҳодисалари

10.2.1. Металларнинг иссиқлик сизими

Олдинги бўлимда металлларнинг иссиқлик ўтказувчанлик коэффициентини κ ни бир неча классик моделларга асосланган ҳолда топдик. Энди эса уларнинг иссиқлик сизимини кўриб чиқамиз.

Эркин электронлар газига асосланган назариялар учун биз юқорида (10.26) ифодани ҳосил қилганмиз. Ушбу ифодага асосан металлларнинг иссиқлик сизимининг асосий улушини эркин электронлар ҳосил қилади. Тажрибалар эса буни тасдиқламади.

Зоммерфелднинг (1928) Ферми-Дирак тақсимотига асосланган моделига кўра, металллардаги электронларнинг кўп қисми Ферми энергиясидан бир ёки бир неча kT қадар кичик бўлган энергияларга эга бўлади. Бу электронлар энергия ал-

машинувчи тўқнашишларда, шунингдек, иссиқлик ва электр ўтказишда қатнаша олмайдилар, чунки уларга яқин барча энергетик сатҳлар электронлар билан тўла ва у сатҳларга ўтиш Паули принципига асосан тақиқланган. Ҳарорат градиенти ва ташқи электрик майдонни фақат юқори энергияли ($E=4kT$) электронларгина «сеза» оладилар ва улар электр токи ва иссиқлик ўтказишда қатнашадилар. Бундан Зоммерфелд E_F яқинидаги электронлар ҳолатигина металларни иссиқлик ва электр хоссаларини аниқлайди деган тўғри хулосага келди.

Зоммерфелд моделига асосланиб иссиқлик сифимини топамиз. Мушлоқ нол температурада металлнинг бирлик ҳажмидаги электронларнинг тўлиқ энергияси

$$U_o = \int_0^{E_F} E g(E) dE = \frac{E_F^{5/2}}{5\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (10.58)$$

муносабат билан аниқланади. Электронлар зичлиги

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (10.59)$$

булишини ҳисобга олсак,

$$U_o = \frac{3nE_F o}{5} \quad (10.60)$$

келиб чиқади. Демак, $T=0K$ бўлганда ҳар бир электрон ўртача $\frac{3}{5}E_F$ энергияга эга бўлади. Нолдан фарқли температураларда иссиқлик ҳаракати натижасида E_F дан паст оқдаги сатҳдан электронлар E_F дан юқоридаги сатҳларга ўтиб туради. Шунинг учун нолдан фарқли температурада

$$U = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE$$

ёки

$$U = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{E^{3/2} dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (10.61)$$

Баъзи соддалаштиришлардан сўнг ушбу интегрални ҳисоблаб $kT \ll E_F$ учун

$$U = U_0 + \frac{n\pi^2 k^2 T^2}{4E_F} \quad (10.62)$$

муносабатни оламиз. Бундан электронларнинг иссиқлик сизими C_e учун

$$C_e = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{n\pi^2 k^2 T}{2E_F} \quad (10.63)$$

натижага келамиз. Классик(мумтоз) сизимни $C_{кл} = (3/2)nk$ билан белгиласак,

$$C_e = \frac{\pi^2 k T}{3E_F} C_{кл} \quad (10.64)$$

ифода ҳосил бўлади. Электронларнинг иссиқлик сизими $C_{кл}$ сизимдан $E_F/3kT$ марта кичик экан. Баъзан буни металлларнинг иссиқлик сизимини айниши деб ҳам аталади. $kT \ll E_F$ шарт бажарилган электронлар газини айниган электронлар гази деб номланади. Металлларнинг тўлиқ иссиқлик сизими Дебай кўрсатгандек панжаравий ташкил этувчидан ва электрон гази иссиқлик сизими C_e дан иборат. Паст температураларда панжаравий ташкил этувчи T^3 га, C_e эса T га пропорционал, шунинг учун C_e ни паст температураларда ўлчанади. Электронлар солиштирма иссиқлик сизимини Ферми сатҳидаги ҳолатлар зичлиги $g(E_F)$ орқали ифодалашимиз мумкин:

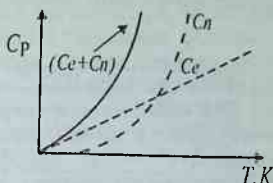
$$C_e = \left(\frac{\pi^3}{3} \right) k^2 T g(E_F). \quad (10.65)$$

Хулоса қилиб шуни айтиш мумкинки, металлларнинг иссиқлик сизими асосан иккита қисмдан ташкил топган:

$$C_p = AT + BT^3 \quad (10.66)$$

Биринчи қўшилувчилар металллардаги электронларнинг улуши бўлиб, бу сизимга классик(мумтоз) назариялардан фарқли ўлароқ, фақат энергияси Ферми энергияси E_F дан каттароқ бўлган электронларгина ҳисса қўша олади. Паст температураларда ($T \rightarrow 0K$) ушбу қўшилувчи муҳим ўрин тутаяди.

Иккинчи қўшилувчи металлар кристалл панжараси тебранишлари (фононлар) ҳиссаси бўлиб, улар юқори температураларда катталашиб боради. Паст температураларда у нолга интилади (10.2-чизма). Юқори температураларда, жумладан хона температураида, иссиқлик сизимининг панжаравий ташкил этувчиси $C_{пан}$ C_e га нисбатан анча катта, шунинг учун C_e ни ҳисобга олмаса ҳам бўлади. Ушбу икки сизимни тажрибада алоҳида ўлчаб уларнинг температураларга боғлиқлиги функциясини аниқлашимиз мумкин. Масалан, бир мол мис учун $C_e = 0.9 \cdot 10^{-4} RT$ ва палладий учун $C_e = 1.6 \cdot 10^{-4} RT$ бўлиши аниқланган.



10.2- чизма. Металлар иссиқлик сизими. $C_{пан}$ —иссиқлик сизимининг панжаравий ташкил этувчиси; C_e —электрон ташкил этувчиси.

10.2.2. Металларнинг солиштирма электр қаршилигининг температура коэффициенти

Металларнинг электр қаршилиги температурага боғлиқ равишда ўзгаради. Температура ортиши билан қаршилик ортиб боради, пасайганда эса маълум бир температурагача пасайиб боради. Жуда паст температураларда металларнинг солиштирма қаршилиги маълум бир қийматга ρ_A га эришади ва у температура ўзгаришига боғлиқ бўлмайди. ρ_A металлдаги ёт аралашмаларга ва нуқсонларга боғлиқ бўлиб, уни қолдиқ қаршилик, деб ҳам юритилади. Ҳозирги тасаввурларга кўра, металларнинг солиштирма электр қаршилиги электронларнинг фононлар ва нуқсонлар билан таъсирлашувидан келиб чиқади, яъни

$$\rho = \rho_{\phi} + \rho_{II} \quad (10.67)$$

ёки ўтказувчанлик орқали ёзсак,

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_{\phi}} + \frac{1}{\sigma_{II}} \quad (10.68)$$

Охириги икки ифода Маттисен қонидаси деб номланади. Юқори (хона) температураларида солиштирма қаршиликнинг температурага боғлиқлиги

$$\rho = \rho_0(1 + \alpha T) \quad (10.69)$$

кўринишда бўлади, бунда α - солиштирма электр қаршиликнинг температура коэффициенти деб аталади. Баъзи металлар учун α нинг қийматлари 10.1- жадвалда келтирилган.

10.1-жадвал

№	Металл номи	$\alpha, 10^{-3} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$	№	Металл номи	$\alpha, 10^{-3} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$
1	Алюминий	1,2	12	Калай	4,4
2	Вольфрам	5	13	Платина	3,9
3	Темир	6	14	Курғош	3,7
4	Олтин	4	15	Синьоб	1,0
5	Константан	0,05	16	Кумуш	4,1
6	Жез	0,1-0,4	17	Рух	4,2
7	Магний	3,9	18	Пулат	1-4
8	Мис	4,3	19	Манган	0,01
9	Никелин	0,1	20	Чуян	1,0
10	Никел	6,5	21	Фекрал	0,1
11	Нихром	0,1	22		

Мутлоқ нолга яқин температураларда (10.69) ифода бажарилмайди, унда солиштирма қаршиликни

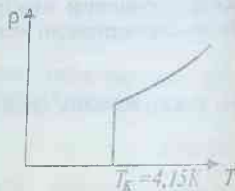
$$\rho = \rho_A + AT^2 + BT^5 \quad (10.70)$$

ифода билан аниқланади. Ушбу муносабатдаги BT^5 қўшилувчи электронларнинг пайжара тебранишлари билан таъсирини ҳисобга олади, AT^2 эса электронларнинг ўзаро туқнашуви ҳисобига ҳосил бўлган қаршиликдир. А ва В лар температурага боғлиқ бўлмаган доимийлардир.

10.2.3. Ҷта ўтказувчанлик

Ҳарорат пасайиши билан металлларнинг солиштирма қаршилиги ρ_A га интилади. Металл қанча тоза ва нуқсонсиз бўлса, ρ_A шунча кичик бўлади. Баъзи металлларнинг электр қаршилиги маълум бир наъс температурага етганда кескин камайиб нолга тенг бўлиб қолади.

Бу ҳодиса ўта ўтказувчанлик ҳолисаси деб номланади. Уни биринчи



10.3-чизма. Ҷта ўтказувчанликка оид чизма.

булиб 1911 йили голландиялик физик Х. Камерлинг-Оннес симобда кузатди (10.3- чизма). Ҳарорат пасайиб $T_k = 4,15K$ га етганда симобнинг электр қаршилиги бирдан йўқолар экан, яъни нолга тенг бўлади. Ўта ўтказувчанликка ўтиш температураси T_k яқин йилларгача 23K дан (Nb_3Ge) ортмаган эди. Бу эса уларни фан ва техникада кенг қўлланишига тўсқинлик қиларди, чунки паст температураларни ҳосил қилиш техник жиҳатдан қийин ва қимматдир. 1986 йили немис физиги Мюллер La, Ba, Cu, O лардан тузилган керамик қотишмада 60K да ўта ўтказувчанликни кузатди. Кейинроқ La ни Y билан алмаштирилганда Y-Ba-Cu-O керамикада $T_k = 94K$ эканлиги аниқланди. Бу янгилик қаттиқ жисмлар физикасининг катта ютуғи эди. Ушбу ўта ўтказувчан материаллар учун T_k суёқ азотнинг қайнаш температураси $T_k = 77, 4K$ дан ҳам ошиб кетди. Бу эса уларнинг техникадаги қўлланилишини ва уларни ўрганишни анча осонлаштирди, чунки суёқ азотни олиш инсбатан осон ва арзондир. Ўта ўтказувчанлик ҳодисаси очилгандан сўнг 46 йил давомида унга ҳеч қандай эътибор берилмади.

1957 йили Бардин, Купер ва Шриффер биринчи бўлиб ўта ўтказувчанлик назариясини ишлаб чиқдилар (БКШ — назарияси).

Унга асосан, металллардаги икки электрон орасидаги ўзаро таъсир энергияси икки қисмдан иборат:

$$V = V_k + V_a \quad (10.71)$$

V_k улар орасидаги кулон таъсир кучларининг потенциал энергияси. V_k доим нолдан катта бўлади, яъни электронлар бир-бирига қарама қарши кучлар билан таъсир этадилар.

V_a — эса электронларнинг кристалл панжара билан ўзаро таъсир энергиясини ифодалайди.

Бу энергия паст температураларда манфий бўлиши ҳам мумкин экан. Бу эса электронларнинг кристалл панжараси воқитасида бир-бирига тортилишини билдиради (маълумки, икки зарра орасидаги таъсир энергияси манфий бўлса, бу зарралар ўзаро тортишади).

БКШ назариясига асосан ана шу куч таъсирида электронлар бир хил бўлишига қарамай ўзаро жуфтлар ҳосил қиладилар. Уларни Купер жуфтлари деб аталди.

Купер жуфтларидаги электронларнинг спинлари қарама-қарши йўналган бўлиб, умумий спин нолга тенг, шунинг учун улар Бозе-Эйнштейн статистикасига бўйсунди. Ўта ўтказувчанлик ҳосил қилишда металлларда Купер жуфтлари асосий роль ўйнайди. Кўп ҳолларда Купер жуфтларининг ўта оқувчанлик билан қийслаб, Бозе конденсати деб юритилади.

Ҳозирги кунда ўта ўтказувчанликнинг бошқа механизмлари (масалан, экситон механизми) тўғрисида янги фикрлар мавжуд. Ўта ўтказувчанлик механизмлари тўлиқ ишлаб чиқилмаган ва ҳозир изчил изланишлар давом этмоқда.

10.2.4. Металлардаги термоэлектрик ҳодисалар

10.2.4.1. Зеебек эффеќти

Ингичка металл стерженни олиб унинг икки учини T_1 ва T_2 температураларда сақлаймиз. Стержен бўйлаб температура фарқи пайдо бўлади. Иссиқроқ T_1 температурали учидан совуқроқ T_2 учига қараб иссиқлик оқими вужудга келади. Хона температураларида иссиқлик асосан кристалл панжараси тебранишлари ҳисобига фононлар орқали узатилади.

Температура градиенти (фарқи) металлнинг икки учидан электр юритувчи куч (э.ю.к) E ҳосил қилади. Бу ҳодиса Зеебек эффеќти деб номланади (уни 1821 йили немис физиги Зеебек очган).

Ҳосил бўлган э.ю.к температура $T-1\pm 100^\circ\text{C}$ бўлганда,

$$E = \alpha(T_1 - T_2) \quad (10.72)$$

ифода билан аниқланади. Бунда α - Зеебек коэффеќиенти (ёки термо э.ю.к коэффеќиенти) деб аталади. Стерженда термо э.ю.к нинг пайдо бўлиши қуйидагича изоҳланади.

Стерженнинг иссиқ учидан совуқ учига йўналган фононлар сони совуқ учидан иссиқ учига йўналган фононлар сонидан кўп бўлади. Фононлар ўзлари билан бирга эркин электронларни эргаштириб кета олади. Натижада стерженнинг совуқ томонида электронлар сони кўпайиб кетади, иссиқ томонида эса ортиқча мусбат заряд пайдо бўлади. Бу эса стерженда э.ю.к ни вужудга келтиради. Зеебек эффеќти икки хил ўтказгич бири-бирига уланганда ҳам кузатилади. Бунда температуралар фарқи ўтказгичларнинг уланиш нуқтаси билан бошқа учлари орасида ҳосил қилинади. Ушбу ҳолда ҳам (10.72) ифода ўринли бўлади.

Узаро уланган икки хил ўтказгичларни термо жуфт деб аталади. 10.2-жадвалда бири қўرғошиндан бўлган термо жуфтлар учун α нинг қийматлари келтирилган. Жадвалдаги манфий ишора ток иккинчи ўтказгичдан қўрғошин ўтказгич томон оқаётганини англатади.

10.2-жадвал

№	Металл+Ръ	$\alpha, 10^{-6} \text{В/К}$	№	Металл+Ръ	$\alpha, 10^{-6} \text{В/К}$
1	Темир	15	12	Синьоб	-4,4
2	Молибден	7,6	13	Платина	-4,4
3	Кадмий	4,6	14	Натрий	-6,5
4	Вольфрам	3,6	15	Палладий	-8,9
5	Мис	3,2	16	Калий	13,8
6	Рух	3,1	17	Никел	-20,8
7	Олтин	2,9	18	Висмут	-68,0
8	Кумуш	2,7	19	Хромел	24,0
9	Калай	-0,2	20	Нихром	18
10	Магний	-0,0	21	Алюмел	-17,3
11	Алюминий	-0,4	22	Копел	-38
			23	Константан	-38

Терможуфтлар ёрдамида юқори температураларни ўлчаш кўлай. Жадвалдаги келтирилган натижаларни жуда аниқ деб бўлмайд, чунки термо э.ю.к қиймати металлар уланган жойдаги ёт аралашмалар, кристалл доначалар йўналишига кучли боғлиқ бўлади.

10.2.4.2. Томсон эффекти

Доимий температура фарқи ҳосил қилинган металл стерженни кўриб чиқамиз. Унинг иссиқ учи температураси T_1 , совуқ учи температураси T_2 бўлсин. ўтказгични доимий ток манбаига улаймиз.

Ундан электр токи ўта бошлайди ва Жоул-Ленц қонунига кўра

$$Q_{\text{ж}} = I^2 R t \quad (10.73)$$

миқдорда Жоул иссиқлиги ажралиб чиқади. Бунда I — стержендаги ток кучи, R — унинг электр қаршилиги ва t — ток ўтиш вақти. 1356 йили инглиз физиги У. Томсон (лорд Келвин) юқорида келтирилган доимий температура градиентига эга бўлган (бир учи T_1 ва иккинчи учи T_2 температурали) токли ўтказгичда Жоул иссиқлиги $Q_{\text{ж}}$ дан

ташқари яна қўшимча иссиқлик миқдори — Q_S ажралиб чиқиши, ёки ютилиши мумкин эканлигини олдиндан айтиб беради. Бу фикр кейинчалик француз физиги Леру тажрибала-рида тасдиқланди ва Томсон эффекти деб номланди. Ўтказгичда ажралиб чиқаётган тўлиқ иссиқлик миқдори

$$Q = Q_J \pm Q_S \quad (10.74)$$

қўринишда ёзилади. Q_S нинг ишораси токнинг ва температура градиентининг ўзаро йўналишига боғлиқ. Агар ток ўтказгичнинг совуқ учидан иссиқ учи томон йўналса, Q_S мус-бат бўлиб ўтказгичда қўшимча иссиқлик миқдори ажралиб чиқади. Бунда металлдаги электронлар иссиқ учидан совуқ учи томон йўналади. Ток йўналишини тескарига ўзгартирсак, Q_S манфий ва иссиқлик ютилади.

Металларнинг эркин электронлар назарияси доирасида ушбу ҳодиса қуйидагича изоҳланади.

Ўтказгичнинг иссиқ қисмидаги электронларнинг ўртача кинетик энергияси совуқ қисмидагидан катта бўлади. Ташқи электр юритувчи куч таъсирида электронлар металлнинг совуқ қисмига қараб дрейф ҳаракат қилганда, совуқ қисмга етиб келгач, кристалл панжараси ионлари билан тўқнашиб, бир қисм энергияларини уларга беради ва «совийди».

Натижада уларнинг ўртача кинетик энергияси ўтказгичнинг совуқ қисмидаги электронларники билан тен-глашади. Бунда ўтказгичда қўшимча Q_S миқдорда иссиқлик ажралиб чиқади.

Агар ток йўналишини ўзгартирсак, совуқ электронлар ўтказгичнинг иссиқ қисмига қараб ҳаракат қилади ва термо динамик мувозанатга келиш учун панжара ионларининг бир қисм энергиясини ютади. Томсон иссиқлиги Q_S ўтказгичдан оқиб ўтган заряд миқдори ва унинг учларидаги температуралар фарқига пропорционал:

$$Q_S = \tau_r (T_1 - T_2) I. \quad (10.75)$$

Бунда τ_r Томсон коэффициентини деб аталади.

Ушбу ифода хона температурасига яқин ва унча катта бўлмаган температуралар оралиғида бажарилади. Томсон наза-

риясига асосон, икки ўтказгичдан ясалган термोजуфтликларнинг α Зеебек коэффициентига Томсон коэффициентига боғлиқ экан.

$$\tau_1 = T \frac{d\alpha}{dT}. \quad (10.76)$$

Охириги ифода Томсон ва Зеебек ҳодисаларини ўзаро боғловчи муносабатдир.

10.2.4.3. Пелте эффекти

Икки турдаги бир хил температурали ўтказгич бир-бирига уланган жойдан I ток ўтганда, у жойда қўшимча Q_n иссиқлик миқдори ажралиб чиқиши ёки ютилиши ҳодисаси Пелте эффекти деб аталади. Бу ҳодисада ҳам иссиқликнинг ютилиши ёки ажралиб чиқиши ток йўналишига боғлиқ. Ҳодисани биринчи бўлиб 1834 йили француз физиги Ж. Пелте кузатган.

Ажралиб чиққан иссиқлик миқдори

$$Q_n = I \Delta P \quad (10.77)$$

ифода билан аниқланади. Бунда

$$\Delta P = (\alpha_1 - \alpha_2) T \quad (10.78)$$

бўлиб, P ни Пелте коэффициенти деб номланади.

α_1, α_2 лар эса ўтказгичларнинг термоэлектрик (Зеебек) коэффициентлари.

Пелте ҳодисаси кўп ҳолларда электр тармоқлар учун зарарлидир. Электр энергияни узатишда ва фойдаланишда турли хил ўтказгичлар қўлланилади (алюминий, мис, жез, нихром ва бошқалар). Уларнинг бир-бирига уланиш нуқталарида эса фойдасиз қўшимча Q_n иссиқлик миқдори ажралиб чиқади.

Бу иссиқлик ўтказгич контактларининг қизишига олиб келади. Натижада ўтказгичларнинг атмосферадаги кислород билан оксидланиш жараёни (занглаши) тезлашади. Ушбу ҳодиса билан курашиш учун, (10.78) ифодадан кўриниб турибдики, $(\alpha_1 - \alpha_2)$ ни камайтириш керак. Бу ҳолларда эса уловчи қурилмалар (розетка, вилка ва ҳ.к.) материалининг α си α_1 ва α_2 оралигида танлаб олинади.

Масалан, алюминий ва мис ўтказгичларнинг уланиш нуқталарида жез ишлатилади.

Пелте эффекти турли металллардаги электронларнинг ўртача энергиялари бир хил температурада ҳам турлича бўлиши билан тушунтирилади. Дарҳақиқат, металлдаги электронларнинг ўртача энергияси уларнинг энергетик спектрига, концентрациясига ва энергиясини йўқотиш механизмларига боғлиқ. Электронлар э.ю.к таъсирида бир металлдан иккинчисига ўтганда ўзининг ортиқча энергиясини кристалл панжараси ионларига беради, ёки электроннинг энергияси кам бўлса, кўшимча энергия ютади.

Бу ҳодиса электронларнинг ўртача энергияси фарқи катта бўлган ўтказгичларда (масалан, металл — ярим ўтказгич контактида) яққол намоён бўлади. Пелте эффектидан техникада совуткичлар тайёрлашда фойдаланилади.

10.3. Металлларнинг зоналар назарияси

Зоналар назариясига мувофиқ қаттиқ жисмлардаги электронлар энергияси кетма-кет жойлашган маълум бир энергия оралиқларидаги қийматларнигина қабул қила олади. Бу энергия оралиқлари рухсат этилган энергия зоналари деб аталади.

Электронлар қабул қила олмайдиган энергия оралиқларини тақиқланган зоналар дейилади.

Металл атоми ёлғиз турганда ундаги барча электронлар аниқ энергия қийматларига эга бўлади.

Унга иккинчи атомни яқинлаштирсак, улардаги электрон булутлар ўзаро кириша бошлайди.

Энергетик сатҳлар ва ундаги электронлар иккала атом учун умумий бўлиб қолади. Лекин, Паули принципига асосан бир энергетик сатҳда иккита қарама-қарши спинли электронлардан ортиқча электронлар жойлаша олмайди, шунинг учун сатҳларнинг кенгайиши (айниши) кузатилади. Ҳар бир сатҳ иккита ёнма-ён жойлашган сатҳга айланади. Энди агар атомлар сони иккита эмас, жуда кўп (N та) бўлса, кенгайган икки сатҳлар орасида яна $N-2$ та сатҳ жойлашади. Натижада ёлғиз атомнинг энергетик сатҳидан рухсат этилган зона ҳосил бўлади.

Зонадаги сатҳлар орасидаги фарқ жуда кичик бўлади (макроскопик кристаллар учун), шунинг учун ундаги электронлар энергияси деярли узлуксиз ўзгаради деб олишимиз мумкин.

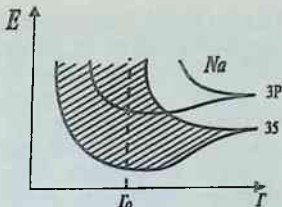
10.4- чизмада натрий метали атомларининг $3s$ ва $3p$ сатҳларининг кенгайиши кўрсатилган. Чизмадан кўриниб турибдики, натрий атомлари орасидаги масофа кичраиб борган сари сатҳлар парчаланиши катталашади.

Бунда r_0 нормал шароитда натрий кристалли атомлари орасидаги масофа. Демак, натрий атомлари кристалл ҳолатда $3p$ ва $3s$ сатҳлари кенгайиб бир-бирини қоплаб кетувчи рухсат этилган зона ҳосил қилар экан. Зоналар назариясига асосланиб, металлнинг, қолаверса бошқа қаттиқ жисмларнинг физик хоссаларини тушунтириш анча қулай. Металлларнинг электр ўтказувчанлиги зоналар назариясида уларда электронлар билан тўлиқ тўлдирилмаган энергетик зоналарнинг борлиги билан тушунтирилади.

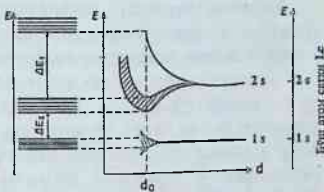
Бундай зонада электрон ўз энергиясини узулуксиз кичик қийматларга ўзгартира олади, чунки зонада тўлдирилмаган сатҳлар кўп.

Бундай чала тўлдирилган зонани ўтказувчанлик зонаси деб ҳам аталади. 10.5- чизмада литий кристаллининг зоналари кўрсатилган. Энг пастки зона $1s$ — сатҳнинг кенгайишидан ҳосил бўлган ва у электронлар билан тўла. Уни валент зонаси деб аталади. $2s$ — сатҳнинг айнаши (парчаланиши) ҳисобига ҳосил бўлган иккинчи зона эса чала (ярми) тўлган.

Ундаги электронлар озгина ташқи таъсир натижасида энергияларини оширишлари мумкин. Бунинг учун зонада бўш сатҳлар мавжуд. Кристаллга ташқи электр майдон ёки температура градиенти қўйилганда иккинчи зонадаги электронлар осонлик билан ўз тезликларини, ҳаракат йўналишини ва энергияларини ўзгартира оладилар. Литий кристаллининг электр токи ва иссиқликни яхши ўтказишини ана шу ўтказувчанлик зонаси мавжудлиги билан тушунтириш мумкин.



10.4- чизма. Натрий металлда электронлар энергиялари зонаси ҳосил бўлиши.



10.5-расм. Литий металлда энергия зоналари ҳосил бўлиши.

Умуман барча металллар учун ана шундай чала тўлган энергетик зоналарнинг бўлиши хосдир. Металлларнинг зоналари тузилишини 3 турга ажратиш мумкин.

Биринчи турга юқорида кўрган литий кристалли мисол бўла олади. Бундай металлларнинг зоналари бир-бирини қоплайди. Улар алоҳида ажратилган ҳолда жойлашадилар ва қуйи зоналардан бири қопланмаган бўлади (10.6- чизма, а).

Расмда катак чизиқларда электронлар билан тўлган сатҳлар белгиланган, А — юқоридаги зонанинг пастки чегараси (туби), В — пастдаги зонанинг шипи.

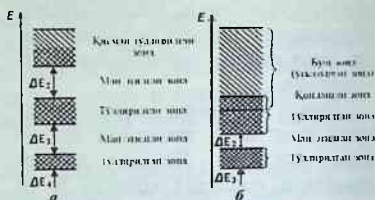
Иккинчи турдаги зонада натрий кристаллини мисол қилишимиз мумкин. Бундай металлларда пастдаги зона тўлмаган бўлиб юқоридаги зона пастки зона устига қопланиб кетади (10.6- чизма, б).

Натижада жуда кенг ўтказувчанлик зонаси ҳосил бўлади.

Учинчи турдаги зонада пастки зона электронлар билан тўлади, лекин юқориги зона билан қопланиш ҳисобига ўтказувчанлик зонаси вужудга келади (10.6- чизма, в). Бунга магний кристаллини мисол қилишимиз мумкин. Магнийнинг электрон конфигурацияси $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2]$ кўринишга эга. Магний атомини барча энергия сатҳлари электронлар билан тўлдирилган. Агар магний кристаллида сатҳлар бир-бирини қопламасдан кенгайганида у изолятор бўлиши керак эди, чунки унда чала тўлдирилган сатҳ йўқ. Аслида эса магний кристаллидаги $3p$ сатҳ кенгайиши натижасида $3s$ сатҳ зонасини бироз қоплаб туради. Натижада $3s$ сатҳ юқорисиди бўш сатҳлар ҳосил бўлади. Шунинг учун магний ҳам металллар хоссасини намоён қилади.

10.4. Металларда электрон эмиссияси

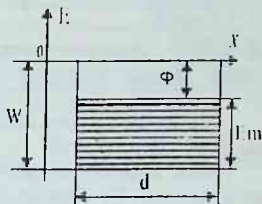
Электронларнинг бирор таъсир натижасида металлдан учиб чиқиш ҳодисаси электрон эмиссияси деб аталади. Электрон эмиссияси асосан уч хил бўлади: термoeлектрон, авто ва фото эмиссия (ташқи фото эффект).



10.6- чизма. Энергия зоналарининг учта хусусий ҳоли

Металлни қиздирганимизда унинг сиртидан электронларнинг учиб чиқишини термоэлектрон эмиссияси деб аталади. Ушбу ҳодисаларни тушунтиришда металл ичидаги турли жараёнларнинг аҳамияти унча катта бўлмаганлиги учун, потенциал ўра моделидан фойдаланилади. Моделга асосан металл чуқурлиги W га тенг потенциал ўрадан ташкил топган. Бу энергия манфий бўлганлиги учун металл билан электронлар орасида тортишиш кучи мавжуд. E_m электронларнинг максимал кинетик энергияси, ϕ — чиқиш иши ва d — металлнинг узунлиги (10.7- чизма).

Металл қиздирилган сари иссиқлик флукутацоналари натижасида энергияси $E > W$ бўлган электронлар сонни ортиб боради. Бу электронларнинг бир қисми металл сиртига учиб чиқади, бир қисми эса сиртидан орқага қайтади. Температура ошган сари металл сиртидан чиқувчи электронлар сонни тобора ортиб боради. Агар металлга ташқи электр майдон қўйсақ (бунда манфий қутбни металлга улаймиз), металлдан учиб чиққан электронлар электр токи ҳосил қилади. Ҳосил бўлган ток зичлиги учун

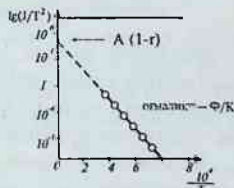


10.7- чизма. Чиқиш ишини тушунтирадиган чизма.

$$j = AT^2(1-r) \exp(-\phi/kT) \quad (10.79)$$

муносабат ўринли бўлади ва уни Ричардсон-Дэшман қонуни деб аталади. Бунда r — электронларнинг металл сиртидан қайтиш коэффициенти. $A = (emk^2/2\pi^2h^3) = 1.2 \cdot 10^6 \text{ A/(m}^2\text{k}^2)$. Чиқиш иши ϕ билан $A(1-r)$ ларни $\ln(j/T^2)$ нинг $1/T$ га боғлиқлиги графигидан тажрибада аниқлаш мумкин (10.8- чизма).

Графикни ордината ўқи билан кесинган нуқтаси $A(1-r)$ га тенг бўлади. Огиш бурчаги тангенен



10.8- чизма. Термоэлектрон токнинг температурага боғланлиги.

эса $(-q/k)$ га тенг. 10.3- жадвалаа баъзи металллар учун чиқиш иши ва $A(1-r)$ Ричардсон доимийларининг ўлчаш натижалари келтирилган.

10.3- жадвал

№	Металл	Чиқиш иши ϕ , эВ	$A(1-r)$, $A(\text{м}^2\text{к}^2) \cdot 10^8$
1	Платина	5,3	0,32
2	Вольфрам	4,5	0,72
3	Молибден	4,4	1,15
4	Тантал	4,1	0,37
5	Калий	3,2	0,60
6	Барий	2,5	0,25
7	Цезий	1,8	1,60
8	Цезийланган вольфрам	1,4	0,03

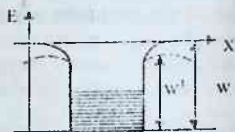
Аниқ ўлчашларининг кўрсатишича, ϕ температура ўзгариши билан бироз ўзгаради экан.

Турли кристаллографик текисликлар учун ҳам ϕ озгина фарқ қилади. Бу фарқни зоналар назарияси асосида тунунтириш мумкин. Ҳақиқий металлларнинг потенциал ўраси кўриниши 10.7- чизмада кўрсатилгандек тик ва кескин ўзгарадиган бўлмайди.

Энергия охиши билан дастлаб $\Psi(x)$ — чизиқий ортиб боради ва металл сирти яқинида эгриланади.

Агар металлнинг совуқ ҳолатида унга кучлироқ электр майдон қўйилса, унинг потенциал тўсиги пасаяди. (10.9- чизма, пунктир чизиқ). Натижада чиқиш иши кичираяди. Агар ташқи қўйилган майдон кучланганлиги E бўлса потенциал тўсиқ баланглиги

$$\Psi^0 = \Psi - \sqrt{\frac{e^3 E}{4\pi\epsilon_0}} \quad (10.80)$$



10.9- чизма. Электр майдонда металлнинг потенциал тўсиқ баланглиги.

га тенг бўлиб қолади. Чиқиш ишининг озгина камайиши ҳам кўп электронларнинг эмиссияда қатнашишига олиб келади. Бу ҳодисани ташқи электр майдон таъсиридаги эмиссия ёки Шотки эмиссияси деб аталади. Агар $E \sim 10^8 \frac{В}{\text{см}}$ гача кучайтирилса, потенциал тўсиқ шу даражада пасаядiki, кўп электронлар бемалол ундан ўтиб кетаверадилар. Энди электронларни чиқариш учун металлни

қиздиришга ҳам ҳожат қолмайди. Бу ҳодисани совуқ эмиссия ёки автоэлектрон эмиссия деб юритилади. Кучли электр майдон таъсирида потенциал тўсиқининг қалинлиги ҳам камаяди.

Бу эса туннел эффекти аҳамиятини оширади. Электр майдон маълум бир критик қийматга етганда энергияси E_f га тенг бўлган Ферми сатҳидаги электронлар туннел ўтиш имкониятига эга бўладилар (бунда тўсиқ қалинлиги $d \sim 10 \text{ \AA}$ атрофида бўлади).

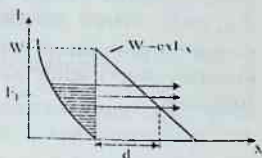
Фаулер ва Норгейм уч бурчак кўринишидаги потенциал тўсиқдан электронларнинг ўтиши эҳтимоллигини таҳлил қилиб, кучли электр майдондаги металдан ўтаётган ток зичлиги учун

$$J = \alpha E^2 \exp(-\beta\phi/E) \quad (10.81)$$

натيجا олдилар (10.10- чизма).

(10.79) ва (10.81) ларни солиштириганимизда совуқ эмиссияда температура эмас, электр майдон муҳим ўрин тутуши маълум бўлади. Потенциал тўсиқ қалинлиги $\sim 10 \text{ \AA}$ бўлмагунча Ферми энергияли электронларнинг туннел ўтиш эҳтимоллиги жуда кичик бўлади. Металларнинг чиқиш ишини $\phi \approx 3 \text{ В}$ деб олган ҳолда совуқ эмиссия бошланиши учун электр майдон кучланганлиги $E_0 \sim 3 \cdot 10^9 \text{ В/м}$ бўлиши кераклигини аниқлаймиз. Тажрибаларда майдон кучланганлигини бундан 30 марта кичик қийматларида ҳам совуқ эмиссия кузатишган.

Бу ҳодисани металл сиртидаги погекиселликларда майдон кучланганлиги E_0 га тенг нуқталар ҳосил бўлади ва шу нуқталар орқали электронлар эмиссияланади деб тушунтирилади. Умуман олганда (10.81) ифода тажриба натижалари билан қониқарли даражада мос келади.



10.10- чизма. Энергетик тўсиқ пасайишини тушунтириш.

10.5. Фотоэмиссия (ташқи фотоэффект)

Ёруғлик нури (фотонлар) таъсирида металл сиртидан электронларнинг учиб чиқиши фотоэмиссия ёки ташқи фотоэффект деб аталади. Бу ҳодисани биринчи бўлиб 1905 йили А. Эйнштейн изоҳлаган. Фотоэмиссияда асосан энергияси E_f га яқин бўлган электронлар иштирок этади. Электромагнит тўлқин — ҳар бири энергияси $h\omega$ бўлган фотонлар оқими металл сиртига тушгач, фотон ўз энергиясини металл сиртига яқин жойлашган E энергияси E_f га яқин бўлган электронга беради. Натижада электроннинг энергияси $E+h\omega$ га тенг бўлади.

Агар $E+h\omega > E_f+\phi$ бўлса, бу электрон металл сиртига учиб чиқиши мумкин. Бунда ϕ металлдан электроннинг чиқиши иши, у Ферми сатҳи E_f дан ҳисобланади. Металлдан учиб чиққан электронлар тезлиги нолдан V_{\max} қийматгача бўлади.

V_{\max} учиб чиққан электронларнинг максимал тезлиги бўлиб, фотон энергиясининг чиқиш ишидан ортиқчаси электроннинг кинетик энергиясига айланади, у Эйнштейн ифодаси орқали топилади:

$$h\omega = \phi + \frac{mV^2}{2} \quad (10.82)$$

Агар фотонлар энергияси $h\omega$ чиқиш ишидан кичик бўлса фотоэффект содир бўлмайди. Кўпгина металллар учун $\phi > 3\text{эВ}$ бўлади. Бундай металллар сиртидан электронларни уриб чиқара олувчи $h\omega \geq \phi$ фотонлар кўзга кўринадиган ва ултрабинафша ёруғлик диапазониغا тўғри келади.

Фотоэмиссияни миқдорий тавсифловчи катталик электронларнинг квант чиқиши β деб номланган ва у металлга тушган бир фотонга мос келувчи учиб чиққан электронлар сонини билдиради. Кўп тоза металллар учун $\beta \sim 10^{-4}$ электрон/фотон.

Металларнинг квант чиқиши бунчалик кичик бўлишига сабаб, ёруғлик металл сиртига $\sim 10^{-5}\text{см}$ чуқурликкача кириб боради ва асосан ўша қатламда ютилади. Бундай қатламдан металл сиртига қараб ҳаракат қилган электронлар йўлдаги тўқнашмишлар натижасида ўз энергиясини йўқотади. Сиртга учиб чиққан фото-

электронларнинг тезликлари турлича бўлиши ҳам шу воссада тушунтирилади. Фотозлектронларнинг кўпчилиги металл сиртидан $\sim 10^{-7}$ см гача бўлган қатламда ҳосил бўлади. Тажрибада фотозэмиссия учун қуйидаги қонуниятлар кузатилади:

а) Учиб чиқаётган электронлар сони металлга тушаётган ёруғлик оқими катталигига пропорционал.

б) Ҳар қандай модда учун фотозэффект ҳосил қилувчи ёруғлик нурунинг чегаравий тўлқин узунлиги λ_0 мавжуд бўлиб, ундан катта тўлқин узунлигида фотозэмиссия кузатилмайти. λ_0 шу модда учун фотозэмиссиянинг қизил чегараси деб аталади.

в) V_{\max} нинг қиймати ёруғлик нури тақрорийлигига пропорционал, лекин ёруғлик оқими катталигига боғлиқ эмас.

Металлларнинг чиқиш ишини камайтириш учун тоза металл сиртида юпқа дипол электр қатлам ҳосил қилинади. Қатлам ҳосил қилишда чиқиш иши кичик атом ва молекула-лар (Cs, Rb, Cs₂O)дан фойдаланилади. Бундай металллар электрвакуум лампалар тайёрлашда ишлатилади.

10.6. Металларнинг магнит хоссалари

Магнит майдонга металлни жойлаштирганимизда унда магнит момент ҳосил бўлади. Бирлик ҳажмнинг магнит моменти (магнитланганлик) \vec{J} вектор билан белгиланади. Агар ташқи майдон кучланганлиги H бўлса, у ҳолда

$$\vec{J} = \chi \vec{H}. \quad (10.83)$$

Бундаги χ — модданинг магнит қабулчанлиги. Модда ичидаги магнит майдон ташқи H ва ички H_V майдонлар йиғиндисидан иборат бўлади, яъни

$$\vec{B} = \vec{H} + \vec{H}_M = \mu \vec{H}. \quad (10.84)$$

бунда \vec{B} — магнит индукция вектори деб аталади, μ эса магнит сингдирувчанликдир.

Модда ичидаги майдон \vec{H}_M магнит моменти билан қуйидагига боғланган:

$$\vec{H}_M = 4\pi \vec{J}, \quad (10.85)$$

у ҳолда

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{I} = \vec{H}(1 + 4\pi\chi), \quad (10.86)$$

бундан

$$\mu = 1 + 4\pi\chi \quad (10.87)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бирор модда учун $\chi < 0$ ёки $\mu < 1$ бўлса, уни диамагнит дейилади, $\chi > 0$ ёки $\mu > 1$ бўлса, парамагнит бўлади.

$\mu > 1$ бўлган моддаларни ферромагнитлар деб аталади. Тўлмаган d ва f электрон қобикқа эга бўлган металлларнинг барчаси парамагнитлардир. (Сг, Мп). Мис, висмут ва бошқа баъзи металллар эса ўзларида диамагнитизмни намоён қилади.

Кўп металлларнинг магнит қабулчанлиги унча катта бўлмайди ($\chi \sim 10^{-6}$) ва температурага кучсиз боғланган.

Диамагнит моддаларнинг ташқи майдон йўқлигида атом ва молекулаларининг магнит моментлари нолга тенг. Шунинг учун электрон қобиклари тўлиқ тўлган атом ва молекулаларда диамагнитизмни кузатиш мумкин.

Парамагнитлар майдон йўқлигида нолдан фарқли магнит моментга эга бўлади. Буларга электрон қобиклари чала тўлдирилган моддалар киради.

Юқоридаги фикрларни жуда аниқ деб бўлмайди, чунки моддаларнинг магнит хоссалари анча мураккабдир. Масалан, мис металл бўлишига қарамасдан диамагнитдир. Бунга сабаб мисда тўла тўлдирилган $3d$ электрон қобикнинг диамагнитизми $4s$ сатҳдаги бир электроннинг парамагнитизмидан кучлироқ бўлади. $3d$ қобикдаги ўнта электроннинг диамагнит эффекти асосий рол ўйнайди. Ag, Au, Zn, Pb ларнинг диамагнитизмини шундай тушунирилади.

Металлардаги ўтказувчан эркин электронларга ташқи магнит майдон таъсири икки хил бўлади. Биринчидан ташқи майдон электронларнинг майдон йўналиши атрофида айланishi (прецессия) олиб келади. Бу айланishi йўналиши Лени қондасига асосан аниқланиб, ҳосил бўлган магнит майдон ташқи майдонга тесқари йўналади.

Бу ҳодиса эркин электронларнинг Ландау диамагнитизми деб аталади.

Ландау диамагнитизмининг магнит қабулчанлиги

$$\chi_d = \frac{4\pi\mu_B^2}{h^2} \sqrt{\frac{\pi^2 n}{9}} \quad (10.88)$$

ифода билан аниқланади. Бунда n — электронлар зичлиги, μ_B — Бор магнетони. Лекин, металлдаги ўтказувчан электронларнинг магнит қабулчанлиги фақат χ_d дан иборат бўлмайди. Маълумки, ҳар бир электрон ўзининг нол бўлмаган доимий магнит моментига эга. Ташқи магнит майдон қўйилганда улар магнит майдон йўналишига параллел ҳолда жойлашадилар. Бу эса ўтказувчан электронларнинг парамагнитизмининг келтириб чиқарачи, унинг қабулчанлиги диамагнит қабулчанликдан 3 марта катта бўлади. Металлларнинг ушбу икки қабулчанлигини электрон-парамагнит резонанс (ЭПР) усули билан алоҳида ўлчаб топиш мумкин. Металлдаги электронларнинг ўзлиқ қабулчанлиги χ_z учун

$$\chi_z = \chi_a - \chi_d = \frac{n\mu_B^2}{E_f} = \frac{n\mu_B^2}{kT_f} \quad (10.89)$$

ифода келтириб чиқарилган. Бунда $E_f = kT_f$ Ферми энергияси. Кўриниб турибдики, металллардаги ўтказувчан электронлар парамагнитизми температурага боғлиқ бўлмайди. Ҳақиқатдан ҳам бу ҳодиса инқорий металллар (Na, K ва б.) учун ўриқлидир. Бир қатор парамагнит металлларнинг қабулчанлиги ушбу Кюри-Вейс қонуни билан аниқланади:

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \quad (10.90)$$

Бу ифодадаги T_c металл ионларининг панжара ичидаги майдон билан таъсирлашувиши ифодалайди ва Кюри нуқтаси деб номланади. Баъзи парамагнит металллар T_c гача совутилганда ферромагнитларга айланади (масалан Fe, Ni).

Бундай металллар учун (10.90) ифодадаги T_c ишораси мусбат бўлади. Агар металл T_c дан паст температураларга совутилганда антиферромагнит ҳолатга ўтса, T_c нинг ишораси манфий олинади (масалан, NiCr, MnS, MnO, Cr₂O₃ ва б.). Баъзи ҳолларда T_c нинг қиймати Кюри нуқтасига мос келмадлиги ҳам мумкин.

Ферромагнитларнинг асосий хоссалари қуйидагилардан иборат.

а) Ферромагнитларнинг магнит синдирувчанлиги ташқи \vec{H} магнит майдонга боғлиқ (10.11- чизма).

Майдон кучланганлиги ортиши билан μ кескин ортади ва $H=2.5\text{Э}$ да максимал қийматга эришади. H ни янада оширсак μ камая бошлайди ва $\mu=1$ қийматга интилади.

б) Ферромагнитлар қолдиқ магнитизмга эга, яъни магнитланган ҳолатини ташқи майдон йўқлигида ҳам сақлаб қолади.

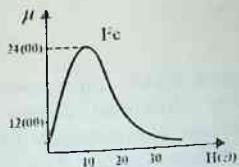
в) Кюри нуқтасидан юқори температураларда ферромагнитлар парамагнит ҳолатига ўтади.

Ферромагнитларда магнит гистерезис ҳодисеси ҳам кузатилади (10.12- чизма). Агар ферромагнитни магнит майдонга қўйиб, аста-секин \vec{H} майдонни орттириб борсак, \vec{J} магнитланганлик ҳам ортиб боради. Маълум бир H_s да \vec{J} ўзгармай қолади, Ферромагнит тўйиниш нуқтасигача магнитланади (А-нуқта).

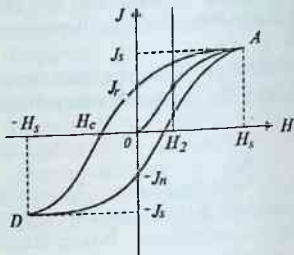
Майдон кучланганлиги \vec{H} ни камайтира бошлаймиз. $\vec{H}=0$ бўлганда $I=I_c$ яъни нолга тенг бўлмайди. Энди майдон йўналишини ўзгартириб, В нуқтага келамиз. Бу ҳам тўйиниш нуқтаси бўлиб, I-бошқа катталашмайди.

Майдонни камайтириб О нуқтага келамиз ва яна А нуқтагача майдон кучланганлигини оширамыз.

Натижада ёпиқ эгри чизик — магнит гистерезис ҳосил бўлади. Бу чизик ферромагнитларга хос бўлиб, уларнинг доимий магнитик моментига эга бўлган зарралардан тузилганлигини билдиради. Бу зарралар ўлчамлари $10^{-2} \div 10^{-5}\text{см}$ бўлиб магнит доменлар деб номланади. Магнит доменларнинг ўз-ўзидан магнитланиб қолиш ҳодисасини Френкел-Гейзенберг назариясига асосланиб тушунтирилади. Унга асосан кристалл панжарасидаги атомлар ўзаро алмашинув энергияси орқали таъсирлашадилар. Алмашинув энергияси-



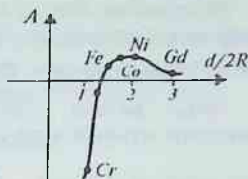
10.11- чизма. Темирнинг магнит синдирувчанлиги $\mu(H)$.



10.12- чизма. Ферромагнит магнитланишда гистерезис ҳодисеси.

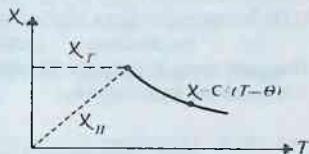
ни тавсифловчи катталик бўлган алмашинув интегралли A муҳим ўрин тутади. Агар $A > 0$ бўлса, доменлардаги электрон спинлар параллел жойлашади. Бунда алмашинув энергияси энг кичик қийматга эга бўлади ва кристалл ферромагнит ҳолатида бўлади.

$A < 0$ да доменлардаги электрон спинлари қарама-қарши жойлашади. Бундай ҳолатни антиферромагнит ҳолати дейилади. 10.13- чизмада алмашинув интегралли A нинг кристалл панжараси доимийси d нинг чала тўлган электронлар қобиғи диаметри $2R$ га нисбатига боғлиқлиги кўрсатилган. Чизмадан кўриниб турибдики, $d/2R < 1,5$ бўлган металллар ферромагнитлар, $d/2R > 1,5$ лар эса антиферромагнитлар ҳисобланади.



10.13- чизма. Ферромагнитлар хоссаларини квантмеханик тушунтириш.

Антиферромагнитларда қўшни ионларнинг магнит моментлари антипараллел йўналган бўлади. Уларнинг магнитланганлиги ташқи майдон йўқлигида нолга тенг, Антиферромагнитнинг парамагнит ҳолатига ўтиш температураси T_N Неел температураси деб номланади. Уларда магнит қабулчанлик $T < T_N$ да кристалл панжараси йўналишига кучли боғлиқ бўлади. Агар майдон йўналиши атомларнинг магнитик моментлари йўналишида бўлса, магнит қабулчанлик температура пасайиши билан нолга интилади. Агар майдон йўналиши магнит моментлари йўналишига тик бўлса, қабулчанлик температурага боғлиқ бўлмайди (10.14- чизма).

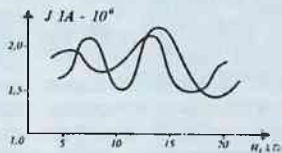


10.14- чизма. Антиферромагнитнинг парамагнетикка ўтиши.

10.7. Де Гааз, Ван Алфен эффекти

1930 йили голланд физиклари Де Гааз, Ван Алфенлар висмутнинг $T = 14,2\text{K}$ даги магнит momenti \bar{J} ни ўлчадилар, тажрибаларнинг кўрсатишича, \bar{J} ташқи майдон ўзгариши билан тебраниб ўзгарган (10.15- чизма).

Бу ҳодисани Де Гааз, Ван Ал-



10.15- чизма. Магнит моментининг даврий ўзгариши

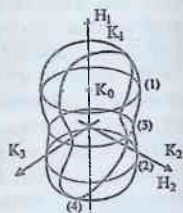
фен эффекти деб номланади. Кейинроқ Онсагер буни куйидагича тушинтирди. Металларнинг магнитланганлигининг тебраниши Ферми сатҳидаги электронлар орбиталарнинг квантланишидан келиб чиқади.

Электронлар Ферми сатҳининг маълум бир орбиталарида (кесимларида) ҳаракат қиладилар. Ферми сатҳининг энг катта ва энг кичик кесим юзалари 10.15-чизмадаги \bar{J} нинг экстремумлари-га тўғри келади. Онсагер \bar{J} нинг тебраниш даври учун куйидаги муносабатни олди:

$$\Delta \left(\frac{1}{H} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar c} \frac{1}{S_e}, \quad (10.91)$$

бунда S_e Ферми сатҳининг ташқи магнит майдони \vec{H} га тик бўлган ихтиёрий экстремал кесими (10.16 — чизма). Магнит майдонда металларнинг электрик ўтказувчанлиги тебранишини ҳам кузатишимиз мумкин (Шубников-Де Гааз эффекти).

Бу ҳодисалар металларнинг Ферми сатҳ сиртини ўрганувчи кучли амалий усуллардир.



10.16- чизма. Магнитик момент ўзгаришини тушунтирувчи чизма.

10.8. Электрон — парамагнит резонанс (ЭПР)

Магнит майдонга жойланган парамагнит зарраларга эга бўлган модданинг электромагнит тўлқин энергиясини резонанс равишда ютиш ҳодисаси электрон-парамагнит резонанс деб номланади. Ташқи майдон \vec{H} таъсирида йиғинди спини S га тенг бўлган зарра $2S+1$ та сатҳга ажралади. Сатҳлар орасидаги энергия фарқи

$$\Delta E = 2\mu_B H \quad (10.92)$$

Дарҳақиқат, эркин электрон учун $S=1/2$, $\mu = g_s \mu_B \mu_s$. Бунда $g_s=2,0023$ (эркин электрон учун) ва $\mu_s = \pm 1/2$. Демак, электрон $E_1 = 1/2 g_s \mu_B \mu_s$, $E_2 = \pm g_s \mu_B \mu_s$ энергияларни қабул қила олади. Унда

$$\Delta E = E_2 - E_1 = g_c \mu_B H \cong 2\mu_B H$$

Электромагнит тўлқин энергияси кванти учун

$$\hbar\omega = \Delta E = g\mu_B H \quad (10.91)$$

шарт бажарилганда кучли ютилиш кузатилади. Бу ҳодиса ёрдамида металллардаги ўтказувчан электронларнинг спинлари ориентациясини, нуқсонларда бошқа ҳодисаларни ўрганиш мумкин.

10.9. Ядромагнит резонанс

Магнит майдондаги модданинг парамагнит ядролари томонидан електромагнит тўлқинларни ютиш ҳодисасини ядромагнит резонанс дейилади. Бунда ташқи майдон таъсирида ядро спини I бир неча сатҳлар ҳосил қилади. Сатҳлар орасидаги энергия фарқи (10.91) ифода билан аниқланади. Фақат g бошқачароқ бўлади. Металларда ўтказувчи электронлар бўлганлиги учун кўп ҳолларда акустик ЯМР дан фойдаланилади. Бунда ташқаридан тушаётган електромагнит тўлқин ўрнига $\hbar\omega$ энергияли фононлар уйғотилади. Бу ҳодисалар ҳам металллардаги кўп катталикларни аниқлаш имконини беради.

10.10. Металларнинг електромагнит тўлқинлар билан ўзаро таъсири

Маълумки, металллар електромагнит тўлқинларни жуда яхши қайтарувчи моддалардир. Юқори частотали электр ток фақат металл сиртидан ўтади. Электромагнит тўлқинлар ҳам жуда кичик қалинликдаги қатламгача кира оладилар. Бу ҳодисани скин эффекти деб номланади. Масалан, $\omega=10^8$ Гц бўлган електромагнит тўлқиннинг мис металлига кириш чуқурлиги $\sigma=6 \cdot 10^{-4}$ см бўлади. Кучли магнитик майдонга жойланган металлда секин сўнувчи електромагнит тўлқин тарқалиши мумкин, натижада скин эффект йўқолади. Масалан, натрий кристалли кучли магнит майдонга жойлаштирилганда ултрабинафша нурлари учун шаффоф бўлиб қолиши мумкин. Металларнинг оптик хоссалари уларнинг диэлектрик сингдирувчанлигидан келиб чиқади:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) - i \frac{4\pi}{\omega} \sigma(\omega), \quad (10.92)$$

бунда $\epsilon(\omega)$ ўтказувчан электронларни ҳисобга олмайдиган ди-электрик сингдирувчанлик, $\sigma(\omega)$ — металлнинг ўтказувчанлиги. Металлларнинг синдириш кўрсаткичи учун

$$n = n' - i\kappa = \sqrt{\epsilon}, \quad (10.93)$$

бунда κ — ёруғликнинг — электромагнит тўлқиннинг ютилиш коэффициенти.

Инфрақизил ва оптик диапазонлар учун биринчи яқинлашишда

$$\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) - \left(\frac{\omega_n}{\omega}\right)^2 \quad (10.94)$$

ифода ўринли бўлади. Бунда ω_n ўтказувчан электронларнинг (электронлар плазмасининг) тебраниш такрорийлиги.

$\omega > \omega_n$ да металлда плазма тебранишлари уйғотилади. $\omega = \omega_n$ лар учун металллар шаффоф бўлади. ω ошиши билан металлларнинг қайтариш коэффициенти γ камаяди ва рентген диапазо-нида металллар билан диэлектриклар орасида фарқ қолмайди.

Тушиш текислигида қутбланган ёруғлик нури металлдан қайта олади (диэлектрикларда қайтмайди).

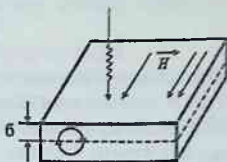
Ясси қутбланган ёруғлик тўлқини металлдан қайтгач эллиптик қутбланади. Бунга сабаб: тушиш текислигида ва унга перпендикуляр текисликда қутбланган нурлар металлдан қайтгач уларда фазалар фарқи ҳосил бўлади.

10.11. Циклотрон резонанс

Магнит майдонга жойлаштирилган металлдаги ўтказувчан электронларга Лоренц кучи таъсир этади. Бу майдон таъсири-да электронлар ҳаракатига майдон йўналишига тик текисликда айланма ҳаракат қўшилади. Агар электроннинг эркин югуриш масофаси айлана узунлигидан катта бўлса, ҳаракат давомида электрон ўз энергиясини йўқотмайди. Электроннинг айланиш такрорийлиги,

$$\omega_c = \frac{eH}{mc} \quad (10.95)$$

муносабат билан аниқланади ва уни циклотрон таққурийлик деб номланди. Металлга ташқаридан $\omega = \omega_c$ таққурийликка эга электромагнит тўлқин туширсак резонанс ҳолати (ски қайтиш) ҳодисаси кузатилади. Буни циклотрон резонанс деб аталади, ҳодисани кузатиш учун эркин югуриш масофаси айлана узунлигидан катта бўлиши керак, тоза металлларда эркин югуриш масофаси асосан электронларнинг фононлар билан тўқнашуви натижасида чегараланади. Шунинг учун металлларда циклотрон резонанс $T=1 \div 10K$ ларда кузатилади. Бунда электронларнинг фононлар билан тўқнашуви жуда кам бўлади. Циклотрон резонансни кузатиш учун магнит майдон металл сиртига параллел йўналтирилади. Электромагнит тўлқин айланмиш орбиталари металл сиртига яқин бўлган электронлар билангина таъсирлаша оладилар, чунки скин эффекти туфайли уларнинг металлга кириб бориш масофаси чегараланган бўлади (10.17- чизма). Циклотрон резонанс ҳодисаси металлдаги электронларнинг энергия спектрини, эффектив массасини аниқлашда қўлланилади. Бу ҳодиса металллардан ташқари ярим ўтказгичларда ҳам кузатилади.



10.17- чизма. Циклотрон резонанс ҳодисасига доир.

10.12. Металллардаги плазма тебранишлари

Маълумки, плазма модданинг тўртинчи агрегат ҳолати бўлиб, унда модда мусбат ва манфий зарядланган зарралар йиғиндисидан иборат бўлади. Плазмадаги турли ишорали зарядлар миқдори ўзаро тенглиги учун электронейтралдир. Металллардаги ўтказувчан электронлар билан қолдиқ атомлар плазма ҳосил қилади деб қарашимиз мумкин. Бу плазма манфий зарядланган ўтказувчан электронлар «гази» ва кристалл панжарасидаги мусбат зарядланган атомлардан иборат бўлади. Бундай плазма ҳам ўзининг хусусий тебраниш таққурийлиги ω_p га эга бўлади.

Фараз қиламиз, металлдаги барча ўтказгич электронлар кристалл панжарага нисбатан маълум бир масофа x га силжийди. У ҳолда электрон «гази»ни орқага қайтарувчи neE куч ҳосил бўлади. Бунда n — электронлар концентрацияси, $E=4\pi tex$ — электр майдон кучланганлиги.

Бу майдон электрон «гази»нинг силжиши ҳисобига пайдо бўлади. Ушбу қайтарувчи куч таъсирида электрон «гази» теб-ранма ҳаракатга келади. Бирлик ҳажмдаги электронлар гуруҳи учун ҳаракат тенгламаси

$$nm \frac{dx^2}{dt^2} = -neE = -4\pi n^2 e^2 x, \quad (10.96)$$

ёки

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \omega_n^2 x = 0. \quad (10.97)$$

Бунда

$$\omega_n = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}} \quad (10.98)$$

плазманинг бўйлама тебраниши такрорийлиги деб номланади. Унинг қиймати металллар учун ултрабинафша тўлқинларга мос келади. Тажрибаларнинг кўрсатишича, металллар такрорийлиги ω_n дан кичик ёруғлик нурларини ўтказмайди, аммо $\omega > \omega_n$ лар-ни эса ўтказиши мумкин.

10.4-жадвалда баъзи металллар учун $\lambda_n = \frac{2\pi c}{\omega_n}$ нинг қийматлари келтирилган.

10.4-жадвал

Металлар	Li	Na	K	Rb	Cs
λ_n (ҳисобланган) (Å)	1550	2090	2870	3220	3620
λ_n (тажрибада) (Å)	1550	2100	3150	3400	--

Металлардаги электрон гази тебранишини металлнинг бирор чегараланган қисмида уйғотиш ҳам мумкин. Масалан, кинетик энергияси 1+10кэВ бўлган тез электронларни юпқа металл қатламдан ўтказганимизда улар металлда маълум бир йўналишларда



10.18- чизма. Плазма тебранишларига доир чизма.

тарқалувчи электрон плазмаси тебранишларини ҳосил қилади (10.18-чизма).

Электрон плазмаси тебранишларининг бундай кванти плазмон деб аталади. Металлга келиб тушган электрон ўз энергиясини узлуксиз эмас, балки бўлаклаб йўқотади. Ҳосил бўлган плазмонларнинг энергияси ~ 10 эВ тартибда бўлади.

Саволлар ва масалалар

1. Металлар электр ўтказувчанлигининг классик(мумтоз) ва квант назариялари ўртасидаги асосий фарқи нимада?

2. Металларнинг энергетик зоналари тузилиши диэлектрик ва ярим ўтказгичларникидан фарқини тушунтиринг.

3. Нима учун металларга электромагнит тўлқин чуқур кириб бора олмайди?

4. Циклотрон резонанс ҳодисасини тушунтиринг.

5. Металларнинг диамагнит, парамагнит ва ферромагнит хоссаларини белгиловчи асосий омилларни айтинг.

6. Металлардаги термоэлектр ҳодисаларини изоҳлаб бering.

7. Алюминий кристалли учун $T=0$ К даги ферми энергиясини топинг. Ҳар бир алюминий атомига учта эркин электрон тўғри келади деб олинсин.

8. Температураси T бўлган металлдаги электронлар билан тўлиш эҳтимоллиги 0,2 ва 0,8 бўлган сатҳлар энергиялари фарқини топинг (kT -бирлигида).

9. Температураси 18°C бўлган металлдаги ферми энергиясидан 0,01 эВ пастдаги сатҳнинг тўлиш эҳтимоллигини топинг.

XI БОБ

ЯРИМ ҲТКАЗГИЧЛАР

Электр ўтказувчанлиги қиймати металллар ($\sigma = 10^{10} \div 10^8 \text{ ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$) ва диэлектриклар ($\sigma = 10^{-8} \div 10^{-12} \text{ ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$) орасида жойлашган моддаларни ярим ўтказгичлар деб аталади. Ярим ўтказгичларнинг яна бир муҳим фарқловчи хусусияти шундан иборатки, температура кўтарилиши билан уларнинг электр ўтказувчанлиги тез ортиб боради. Ушбу моддаларни дастлаб ўрганиш бошланганда қиририлган юқоридаги таърифга ҳозирги кунда бир қатор аниқликлар қўшилган. Бу аниқликлар уларнинг энергетик зоналари тузилиши, заряд ташувчиларнинг хоссаларидан келиб чиқади.

Температуранинг етарлича катта оралиғида ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги экспоненциал ўзгаради:

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_A/kT). \quad (11.1)$$

Бунда E_A ўтказувчанликни фаоллаш энергияси деб номланади ва электронни атомлар билан боғланишининг ўртача энергиясини билдиради. Ҳар қандай температурада иссиқлик ҳаракати энергияси таъсирида ярим ўтказгичдаги валент электронларнинг $\exp(-E_A/kT)$ га пропорционал қисми эркин заряд ташувчилар бўлади. Ярим ўтказгичларнинг ўтказувчанлиги бошқа ташқи таъсирлар (масалан, ёруғлик оқими, зарралар оқими, киришмалар, электр майдон) натижасида ҳам, кўп ҳолларда, экспоненциал ўзгаради. Шунинг учун улар температурага, киришма миқдорига ва бошқа ташқи таъсирларга жуда сезгирдир. Ярим ўтказгичларнинг бу хоссасидан турли хил вазифаларни бажарувчи асбоблар, сезгир қурилмалар қилишда фойдаланилади.

11.1 Ярим ўтказгичларнинг турлари

Ярим ўтказгичларни қандай кимёвий элементлардан ташкил этилганига қараб тўрт турга ажратиш мумкин.

Биринчи турга элементлар даврий жадвалининг IV гуруҳ элементлари Ge ва Si лар киради. Бу элементлар тўрт валент электронга эга бўлиб, ковалент (атом) боғли кристалл панжараси ҳосил қиладилар. Улар бир элемент атомлардан тузилгани учун элементар (содда) ярим ўтказгичлар дейилади.

Иккинчи тур ярим ўтказгичларга даврий системанинг III гуруҳ элементлари (Al, Ga, In) билан V гуруҳ элементлари (P, As, Sb) нинг бирикмалари киради. Улар $A^{III}B^V$ бирикмалар деб белгиланади (GaAs, InSb, GaP, InP ва бошқалар). III гуруҳ элементлари учта валент электронга, V гуруҳ элементлари эса беш валент электронга эга, шунинг учун $A^{III}B^V$ кўринишдаги кимёвий элементда ўртача ҳар бир атом тўрт валент электронга эга бўлади. Уларни *олмоссимон ярим ўтказгичлар* деб аталади. Кристалл панжарасида ҳар бир атом қўшни атом билан тўрт валентли боғланишлар ҳосил қилади. Натижада олмос панжарасига ўхшаш кристалл панжараси ҳосил бўлади. Ушбу турдаги моддаларда ковалент боғланиш етакчи ўрин тутади, шунинг учун улар Ge ва Si га ўхшаш хоссаларни намоён қилади. Даврий жадвалнинг II ва VI гуруҳ элементлари бирикмаларида ҳам ўртача ҳар бир атомга тўртта электрон тўғри келади (ZnTe, ZnSe, CdTe, CdS ва бошқалар). Лекин уларда ион боғланиш ковалент боғланишга нисбатан етакчи ўрин тутади.

Учинчи тур ярим ўтказгичларга даврий жадвалнинг V ва VI гуруҳларининг баъзи элементлари киради. Гуруҳдаги Se ва Te ларнинг ярим ўтказгичлик хоссалари Ge ва Si дан ҳам олдин аниқланган. V гуруҳ элементлари As, Sb ва Bi лар ярим металллар бўлиб, уларнинг кўп хоссалари ярим ўтказгичларга яқиндир. $A^{IV}B^{VI}$ кўринишдаги моддалар (PbS, PbSe, SeTe, GeTe ва бошқалар) ҳам ўртача беш валент электронга эга. Бу моддалар ярим ўтказгичли инфрақизил нурлар қабуллаишида ишлатилади.

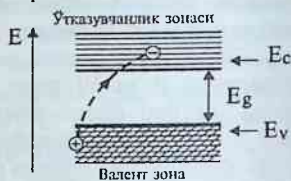
VI гуруҳ элементлари (Se, Te, S, O) нинг I-V-гуруҳ элементлари билан ҳосил қилинган кимёвий бирикмалари ичида

кўп ярим ўтказгич моддалар мавжуд. Масалан, CuO бирикмаси тўғрилагичларда (купроксин тўғрилагич) ва термоэлемент сифатида қўлланилади. Бошқа кўп бирикмаларнинг хоссалари ҳали ўрганилмаган.

Тўртинчи тур ярим ўтказгичларига VI гуруҳ элементларининг ўтиш металлари (Ti , V , Mn , Fe , Ni , Sm , Eu ва бошқалар) билан ҳосил қилинган бирикмалар киради. Уларнинг бирикмаларида ион боғланиш устивор бўлиб, кўп бирикмалар магнит хоссаларга эгадир. Масалан, EuO , EuS , CdCr_2Se_4 ярим ўтказгичлари ферромагнитлардир, EuTe , EuSe , NiO лар эса антиферромагнит хоссага эга. Бундай бирикмаларнинг баъзилари (V_2O_3 , Fe_3O_4 , NiS , Eu_2O ва бошқалар) температура ва босим ўзгариши билан металл ҳолатига ўтиши мумкин.

11.2 Ярим ўтказгичларда хусусий ўтказувчанлик ва зоналар тузилиши

Бегона киришмалар йўқ тоза ҳолдаги ёки киришмалар ҳиссаси кам бўлган, ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги хусусий ўтказувчанлик деб номланади. Тоза ярим ўтказгич моддалар паст температурада электр токини ёмон ўтказди. Бунга сабаб, уларда электроннинг энергетик зоналари тўлдирилиши диэлектриклардагига ўхшашлигилар. $T=0\text{K}$ да ярим ўтказгичларда валент зонаси электронлар билан тўла тўлган бўлиб, унда юқориги зона ўтказувчанлик зонаси бўш бўлади (11.1- чизма).



11.1- чизма Ярим ўтказгичнинг энергия зоналари .

Етарлича паст температура-ларда ўтказувчан зона бўшлиғи учун ярим ўтказгич электр токини ўтказмайди. Температура кўтарилиши билан иссиқлик энергияси таъсирида валент зонадаги баъзи электронлар ўтказувчан зонага ўтиб олади. Валент зонада эса мусбат зарядли коваклар ҳосил бўлади. Металллардан фарқли ўлароқ, ярим ўтказгичларда заряд ташувчилар вазифасини электронлар ва коваклар ўтайди. Ҳақиқий кристаллда бу ҳодиса қуйидагича содир бўлади. Ковалент боғланиш ҳосил қилишда қатнашаётган электр-

тронлардан бири иссиқлик ҳаракати натижасида атомдан узилиб эркин электронга айланади (11.2- чизма).

Электрон стишмаётган боғланиш ҳаракатчан ковакдан иборат. Эркин электрон ҳам, эркин ковак ҳам кристал панжара бўйлаб кўчиб юриши мумкин. Қўшни боғдан электрон тортиб олиш натижасида мазкур жойда ковак йўқолади, лекин қўшни боғда ковак ҳосил бўлади. Бу ҳодиса ковакнинг кўчиб юришидир.

Узилган электронлар яна қайтиб ўзи ҳосил қилган ковакка тушса, эркин электрон ва ковак жуфти йўқолади, буни *рекомбинация* дейилади. Нолдан фарқли температураларда ярим ўтказгичларда албатта бундай коваклар ва ўтказувчанлик электронлари мавжуд бўлади ва улар электр токини ўтказа олади. Ярим ўтказгичларнинг бу хоссаси уларни диэлектриклардан фарқлайди. Диэлектрикларда нормал шароитда бундай заряд ташувчилар бўлмайди ёки жуда кам миқдорда ҳосил бўлади. Тоза ярим ўтказгичларда қанча ўтказувчанлик электронлари пайдо бўлса, шунча коваклар ҳосил бўлади. Мувозанатий ҳолатда ўтказувчанлик электронлари зичлигини n_0 , ковакларникини p_0 деб белгиласак, хусусий ўтказувчанлик учун

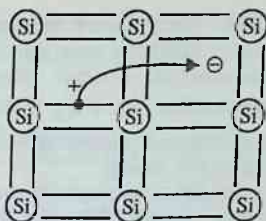
$$n_0 = p_0 = n_i. \quad (11.2)$$

Бундан n_i — хусусий ярим ўтказгичдаги заряд ташувчилар зичлиги (intrinsic — хусусий).

Маълум бир температурадаги заряд ташувчилар миқдори тақиқланган зона кенлигига боғлиқ бўлади. E_g — қанча кичик бўлса, ўтказувчанлик электронлари сони шунча кўп бўлади.

Ge учун $E_g = 0.67$ эВ, Si учун $E_g = 1.14$ эВ ни ташкил қилади. Шунинг учун, масалан, хона температурасида ($T = 300^\circ K$) Ge кристаллдаги ўтказувчанлик электронлари зичлиги Si никидан тахминан 10^3 марта катта.

Ярим ўтказгичларнинг тақиқланган зона кенлигини оптик усулда аниқлаш мумкин. Бунинг учун ярим ўтказгичларда ёруғлик нури ютилиш коэффициентини тўлқин узунлигига боғлиқлиги ўрганилади. Фотон энергияси $\hbar\omega < E_g$ бўлганда у деярли ютили-



11.2- чизма. Эркин электрон ва ковакнинг пайдо бўлиши.

майди, чунки унинг энергияси валент зонадаги электронларни ўтказувчанлик зонасига кўтариш учун етмайди. $\hbar\omega \geq E_g$ бўлганда фотонларнинг ютилиши бошланади (11.3- чизма).

Кристаллда электрон ковак жуфти ҳосил бўлади. Электронларнинг ўтказувчанлик зонасига бундай ўтиш бевосита (яъни тўғри) ўтиш деб номланади. Баъзи ярим ўтказгичларнинг (масалан Ge, Si) зоналар тузилиши мураккаб бўлади. Уларнинг ўтказувчанлик зонасидаги электронлар учун энг кичик энергия (E_{\min})га тўғри келувчи тўлқин вектор k_c , валент зонадаги ковакларнинг энг катта энергиясига мос келувчи тўлқин вектори ($k=0$) билан мос келмайди (11.4-чизма).

Энди бевосита ўтиш учун ҳаракат миқдори сақланиш қонуни бажарилмайди. Лекин, бундай ўтишлар фонон ҳосил бўлиши билан амалга ошириши мумкин. Унда энергия сақланиш қонуни $\hbar\omega_{\phi} = E_g + \hbar\omega_q$. Импульснинг сақланиш қонуни эса

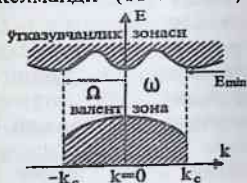
$$\bar{k}_{\phi} = \bar{k}_c + \bar{k}_q \quad (11.3)$$

кўринишда ёзилади.

Бунда ω_{ϕ} ва k_{ϕ} лар уйғотилган фотоннинг такрорийлиги ва тўлқин вектори. Ёруғлик таъсирида электронларнинг бундай ўтиши билвосита ўтиш деб номланади. Билвосита ўтишда ярим ўтказгичларнинг тақиқланган зона кенглигини тўғридан тўғри аниқлаб бўлмайди. Тақиқланган зона чегараси силжиган бўлади. Ярим ўтказгичда ютилган фотон эркин электрон ва ковак ҳосил килади. Энергиянинг бир қисми эса $\hbar\omega_q$ энергияли фонон ҳосил қилишга сарфланади. Баъзи ярим ўтказгичлар учун тақиқланган зона кенглиги 11.1-жадвалда



11.3- чизма. Ярим ўтказгичда ёруғлик ютилишига доир.



11.4- чизма. Тўғри ва нотўғри ўтишлар.



11.5- чизма. Бевосита ўтишлар чегараси.

келтирилган d — ҳарфи билан *бевосита* ўтиш, i — ҳарфи билан *билвосита* ўтиш кузатилган ярим ўтказгичлар белгиланган.

11.1-жадвал

№	Яримўтказгич кристалли	Угини тури	$E_g, \text{Эв}$		№	Яримўтказгич кристалли	Угини тури	$E_g, \text{Эв}$	
			0°K	300°K				0°K	300°K
1	Si	i	1,17	1,14	9	Te	d	0,33	-
2	Ge	i	0,74	0,67	10	PbS	d	0,29	0,35
3	InSb	d	0,23	0,18	11	PbSe	d	0,17	0,27
4	InAs	d	0,36	0,35	12	PbTe	d	0,19	0,3
5	InP	d	1,29	1,35	13	CdS	d	2,58	2,42
6	GaP	i	2,35	2,26	14	CdSe	d	1,84	1,74
7	GaAs	d	1,52	1,43	15	CuTe	d	1,61	1,45
8	AlSb	i	1,65	1,52	16	SnTe	d	0,3	0,18

11.3. Эффе́ктивли масса

Эркин электроннинг энергияси E унинг импульси билан қуйидагича боғланган,

$$E(p) = \frac{p^2}{2m}, \quad (11.4)$$

m — электроннинг тинчликдаги массаси. Лекин электронлар ва бошқа элементар зарралар, квант механикасида кўрсатилганидек, икки ёқлама табиатга эгадир. Мазкур зарралар ўзини (λ — тўлқин узунлигига эга бўлган) тўлқин сингари тутadi (корпускуляр-тўлқин дуализми). Ҳар бир заррага $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$ тўлқин векторини мос қўйишимиз мумкин. Унда электронларнинг импульси

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (11.5)$$

бўлади. Электрон кристалл панжараси ичида ҳаракатланганда унинг ҳаракат тезлиги \vec{v} тўлқин пакетининг гуруҳий тезлигига тенг деб олинади:

$$\vec{v} = \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}. \quad (11.6)$$

Электрон ташқи электр майдон таъсирида тезланиш олсин. Унда унинг тезланиши

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k} \partial t} \right) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt}. \quad (11.7)$$

Бу ифодадаги $(\frac{dk}{dt})$ ни $(\frac{\partial \bar{p}}{h \cdot \partial t})$ га алмаштиришимиз мумкин, у ҳолда

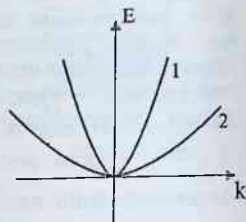
$$\bar{a} = \frac{1}{h^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \cdot \frac{d\bar{p}}{dt} = \frac{1}{h^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \cdot \bar{F}. \quad (11.8)$$

Бунда $\bar{F} = \frac{d\bar{p}}{dt}$ электронга таъсир қилувчи умумий куч. Охирги муносабатдаги \bar{F} кучнинг олдидаги кўпайтувчи тескари масса маъносини англатади.

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{h^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}. \quad (11.9)$$

Ушбу масса электроннинг ҳақиқий гравитацион массаси (m_e) га тенг бўлиши ҳам, тенг бўлмаслиги ҳам мумкин. m^* — электроннинг кристалл панжарадаги ҳаракатининг *эффektivли массаси* деб номланади. Кристалл панжараси бўлмаганда ҳамма электронлар бирор \bar{E} ташқи электр майдон таъсирида бир хил тезланиш олган бўлар эди. Ўша \bar{E} майдон турли кристалл жисмларда ҳосил қилинганда ундаги электронлар ўзларини массалари турлича бўлган зарралардек тутати. Демак, эффektivли масса бу электронларнинг кристалл панжараси билан таъсирлашувчи хоссаларидан келиб чиқувчи катталиқ экан.

Коваклар ҳам ҳеч қандай гравитацион массага эга эмас. Аслида улар кристалл панжарасидаги атомлар атрофидаги мусбат заряди кўпроқ бўлган соҳалардир. Шунга қарамасдан, ташқи электр майдон таъсирида коваклар ўзларини маълум бир m^* эффektivли массага эга бўлган зарралек тутати. Эффektivли массанинг ажойиб хоссаларидан бири шундан иборатки, у мусбат ва манфий қийматга эга бўлиши мумкин. Манфий эффektivли массали электрон ташқи электр майдон таъсирида секинлашади. Бунда электроннинг панжара билан эластик тўқнашиш натижасида олган тескари импульси электр майдон таъсирида олган импульсдан катта бўлади. Натижада электроннинг умумий



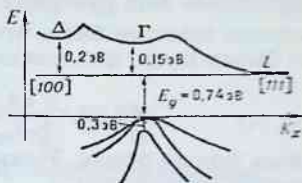
11.6- чизма. Рухсат этилган зона тармоқлари.

электроннинг умумий энергияси $E = \hbar \omega$ га тенг бўлади. Электроннинг умумий импульси $\bar{p} = \hbar k$ га тенг бўлади. Электроннинг умумий энергияси $E = \hbar \omega$ га тенг бўлади. Электроннинг умумий импульси $\bar{p} = \hbar k$ га тенг бўлади. Электроннинг умумий энергияси $E = \hbar \omega$ га тенг бўлади. Электроннинг умумий импульси $\bar{p} = \hbar k$ га тенг бўлади.

мый дрейф тезлиги камайиб боради. Эффе́ктивли масса $E(k)$ функциянинг кўринишига боғлиқ. Агар $E(k)$ тез ўзгариши функция бўлса, унга мос келувчи эффе́ктивли масса кичик бўлади. $E(k)$ секин ўзгарса (11.6- чизма, 2), у ҳолда заряд ташувчиларнинг эффе́ктив массаси катта бўлади. Монокристалларнинг зоналари тузилиши кристалл панжарасидаги йўналишига боғлиқ бўлади. Бу ўз навбатида эффе́ктивли масса-нинг анизотропиясини келтириб чиқаради, яъни заряд ташувчиларнинг эффе́ктивли массаси турли кристаллографияк йўналишларда турлича бўлади. У ҳолда (11.9) ифода куйидагича кўринишда ёзилади:

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (11.10)$$

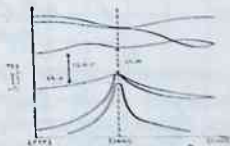
Бунда i, j лар 1, 2, 3 қийматларини қабул қилади. 11.7-чизмада тоза германийнинг (Ge) зона тузилиши келтирилган. $E(k)$ графигидан кўриниб турибдики, Ge да учта энергетик минимум бўлиб, улар Δ, Γ ва L ҳарфлари билан белгиланган. Тақиқланган зона кенглиги E_g энг кичик бўлган энергетик минимум бўлиб, унда $E_g=0.74$ эВ ни ташкил этади. Бу минимум кристаллда $[111]$ йўналишдаги Бриллюэн зонаси яқинида жойлашган. $[100]$ йўналишдаги Δ минимум учун $E_g=0,94$ эВ ни ташкил этади. Бу икки йўналишларда заряд ташувчиларнинг эффе́ктивли массаси ҳам турлича бўлади.



11.7- чизма. Германийда энергетик зоналари тузилиши.

11.4. Хусусий ярим ўтказгичларда электронлар ва коваклар зичлиги

Ярим ўтказгичлардаги заряд ташувчилар зичлиги E_g ва T га боғлиқлигини кўриб чиқамиз. Бунинг учун T температурада валент зонадан ўтказувчанлик зонасига ўтиб олган электронлар сонининг кимёвий потенциал μ



11.8- чизма. Изоотроп ярим ўтказгичнинг зоналар дисперсияси.

(ёки Ферми энергияси сатҳи E_F) га боғлиқлигини тоғамиз. Изотроп ярим ўтказгич валент зонаси шипини $E_v = 0$ деб оламиз (11.8- чизма).

Ўтказувчанлик зонасида E қийматли энергияга эга бўлган электрон учун

$$E = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (11.11)$$

муносабат ўринли бўлсин.

Ўтказувчанлик зонасидаги электронлар учун $E - \mu \gg kT$, у ҳолда электронларнинг Ферми Дирак тақсимотини

$$f_n = \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right). \quad (11.12)$$

кўринишида ёзиб олишимиз мумкин. Бунда $f_n - E$ энергияли сатҳнинг электрон билан банд эканлигининг эҳтимоллиги, E_F эса Ферми сатҳи, ҳолатлар зичлиги учун

$$g(E)dE = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right) \cdot (E - E_g)^{\frac{1}{2}} dE. \quad (11.13)$$

ифода ўринли бўлади. Ўтказувчанлик зонада жойлашган электронлар зичлиги учун

$$n = \int_{E_g}^{\infty} g(E) \cdot f_n(E) dE = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right) \quad (11.14)$$

$$\int_{E_g}^{\infty} (E - E_g)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$$

Интеграл олингандан сўнг:

$$n = 2 \left(\frac{m_n^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{E_F - E_g}{kT}\right). \quad (11.15)$$

Юқоридаги ифода ўтказувчанлик зонадаги электронлар зичлигининг T ва E_g га боғланишини кўрсатади. Агар E_F маълум бўлса, уни ихтиёрий T ва E_g лар учун ҳисоблаб топиш мумкин. Энди худди шу тартибда ярим ўтказгичлардаги коваклар зичлиги p нинг T ва E_g га боғланишини аниқлаймиз. Ко-

вакларнинг тақсимот функцияси электронларнинг тақсимот функцияси f_p билан қуйидагича боғланган:

$$f_p = 1 - f_n \quad (11.16)$$

У ҳолда

$$f_p = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) \quad (11.17)$$

m_p^* — ковакнинг валент зонаси шипидаги эффективли масса-си. Коваклар учун ҳолат зичлиги,

$$g_p(E)dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (-E)^{\frac{1}{2}} dE \quad (11.18)$$

коваклар зичлиги эса,

$$p = \int_{-\infty}^0 g_p(E) f_p(E) dE = 2 \left(\frac{m_p kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \quad (11.19)$$

(11.15) ва (11.19) ифодаларни бир бирига қўпайтирамиз,

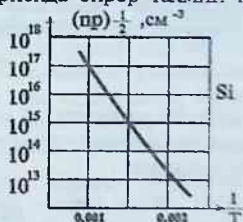
$$np = 4 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar}\right)^3 (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2 \quad (11.20)$$

бу ифода мувозанатий ҳолат учун ўринли бўлиб, *ҳаракатдаги массалар қонуни* деб номланади.

Ушбу муносабат хусусий бўлмаган ярим ўтказгичлар учун ҳам ўринли, чунки биз ҳали хусусийлик тўғрисида бирор таҳмин кил-ритмадик. Ифоданинг яна бир қулайлиги шундан иборатки, унда E_F нинг қиймати қатнашмайди. Хусусий ўтказувчанли: учун ифода қуйидаги қўринишга келади.

$$n_i = p_i = 2 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (11.21)$$

Кремний учун (11.21) ифода ёр-дамида ҳисобланган $(np)^{1/2}$ нинг T га боғланиши 11.9- чизмада келтирилган (узлуксиз чизиқ).



11.9- чизма. Хусусий ярим ўтказгичда $(np)^{1/2}$ нинг температура T га боғланиши.

Графикдаги нуқталар тажрибада ўлчанган қийматлар. $T=300\text{K}$ да кремний учун $n_p=4,6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-6}$, германий учун эса $n_p=3,6 \cdot 10^{27} \text{ см}^{-6}$. Ҳисоб-китобларда $m_n^*=m_p^*=m_e$ деб олинган.

Хусусий ўтказувчанлик учун $p=n$, шунинг учун (11.15) ва (11.19) ифодаларни тенглаб

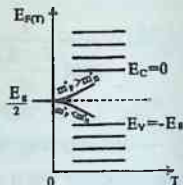
$$\exp\left(\frac{2E_F}{kT}\right) = \left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{E_g}{kT}\right) \quad (11.22)$$

ни ҳосил қиламиз. Охириги натижани логарифмлаб E_F га нисбатан ечамиз:

$$E_F = (1/2)E_g + (3/4)kT \ln(m_p^*/m_n^*) \quad (11.23)$$

Агар $m_n^*=m_p^*$ ва $T=0^\circ\text{K}$ бўлса, $E_F=(1/2)E_g$, температура ортиши билан, агар $m_p^*/m_n^*>1$ бўлса, Ферми сатҳи кўтарилади, $m_p^*/m_n^*<1$ бўлса, у пасаяди (11.10- чизма).

Агар $E_c = 0$ деб олинса, E_g олдидаги ишора ўзгаради.



11.10- чизма. Хусусий ярим ўтказгичда Ферми сатҳи $E_F(T)$.

11.5. Заряд ташувчилар ҳаракатчанлиги.

Заряд ташувчилар ҳаракатчанлиги деб уларнинг дрейф тезлигини электр майдон кучланганлигига нисбатига айтилади.

$$\mu_n = \frac{|v_n|}{E} \quad (11.24)$$

Унинг ишораси электронлар ва коваклар учун бир хил бўлади. Тоза ярим ўтказгичларда ҳаракатчанлиқнинг қийматини электронларнинг фононлар билан тўқнашуви аниқлайди. Электр ўтказувчанлик иккита ташкил этувчидан иборат бўлади:

$$\sigma = (ne\mu_n + pe\mu_p). \quad (11.25)$$

Ушбу ифодани $\sigma = ne^2\tau/m$ билан таққосласак, электрон ва ковакларнинг ҳаракатчанлиги учун қуйидаги муносабатларни топамиз:

$$\mu_n = \frac{e\tau_n}{m_n}; \quad \mu_p = \frac{e\tau_p}{m_p}. \quad (11.26)$$

11.2.-жадвалда баъзи бир ярим ўтказгичлар учун хона температурасидаги ҳаракатчанлиги келтирилган.

Кристалл номи	Харакатчанлик, см ² /В сек	
	μ_n	μ_p
1. Олмос	1800	1200
2. Si	1300	500
3. Ge	4500	3500
4. InSb	77000	750
5. InAs	33000	460
6. InP	4600	150
7. GaSb	4000	1400
8. PbS	550	600
9. PbSb	1020	930
11. PbTe	1620	750
11. AgCl	50	-
12. KBr (100°K)	100	-

11.6. Ярим ўтказгичда киришмалар

Ярим ўтказгич кристалл панжарасига ёт атомларнинг муайян миқдорда кириб қолиши натижасида киришмали ярим ўтказгич ҳосил бўлади. Жуда кам миқдордаги киришмалар ҳам ярим ўтказгичларнинг физик хоссасига катта таъсир кўрсатади. Масалан, тоза кремний кристаллига 0,00001% Бор атомлари киритилганда унинг электр ўтказувчанлиги хона температурасида 100000 марта ошиб кетади.

Кристалл панжарасидаги киришмалар одатда нуқсон ҳисобланади. Агар киришма кристалл панжарасидаги асосий элемент ўрнини эгаллаб олган бўлса уни ўринбосар *қаттиқ эритма дейилади*. Киришма кристалл панжарасидаги атомлар орасига кириб қолган бўлса *суқилма қаттиқ эритма* деб аталади. Киришма ва асосий модда эффективли атом радиуслари орасидаги фарқ 15% дан ошмаган ҳолларда ўринбосар киришмалар ҳосил бўлади. Ундан ташқари киришма валентлигининг асосий атом валентлигидан фарқи ± 1 дан ошмаслиги лозим. Суқилма киришма ҳосил бўлиши учун эса киришма атомнинг эффектив радиуси $r_{kp} \leq 0,59r_a$ бўлиши керак (r_a – асосий атомларнинг эффектив радиуси). Киришмалар панжара даврийлигини бузади, таққиланган зонада маҳаллий сатҳлар ҳосил қилади. Кўп ҳолларда маълум бир параметрли ярим ўтказгич ҳосил қилиш учун атайлаб киришмалар киритилади, буни ярим ўтказгичларни *легирлаш* деб аталади. Киришма ҳосил қилган маҳаллий сатҳ

ўтказувчанлик ёки валент зонасига яқин жойлашган бўлса *саёз сатҳ* деб номланади (11.11-чизма). Агар маҳаллий сатҳлар таққиланган зона ўртасига яқин жойлашган бўлса *чуқур сатҳ* дейилади.

Ионланиш жараёнида ўтказувчан зонага қўшимча электрон берувчи киришма *донор киришма* деб аталади. Мисол тариқасида кремний кристаллига кириб қолган маргумуш (*As*) атомни қўриб чиқайлик (11.12- чизма). Ушбу атом бешта валент электронга эга бўлиб, улардан тўрттаси кремний атоми билан ковалент бонд ҳосил қилишда қатнашади.

Бешинчи валент электрон эса унга заиф боғланган ҳолда бўлади. Бу электронларнинг атомга боғланиш энергиясини топиш учун уни водородсимон атом деб қарашимиз мумкин. Эркин *As* атомида

$$E_i = -\frac{m_0 e^4 z^2}{2\hbar^2}. \quad (11.27)$$

Диэлектрик синдирувчанлиги ϵ бўлган кремний кристаллида бу энергия ϵ^2 марта кичраяди.

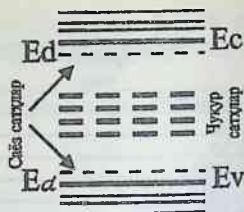
$$E_d = -\frac{m_n^* e^4 z^2}{2\hbar \epsilon^2}. \quad (11.28)$$

Бундан m^* — кристалдаги электроннинг эффектив массаси, m_0 эркин электрон массаси. У ҳолда

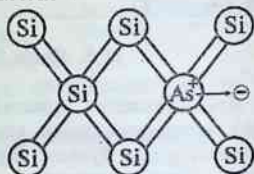
$$E_d = E_i \frac{m_n^*}{\epsilon^2 m_0}. \quad (11.29)$$

Кремний учун $\epsilon \approx 11$ эВ, $\frac{m^*}{m_0} \langle 1$ ва *As* учун $E_i \approx 10 + 15$ эВ эканлиги-

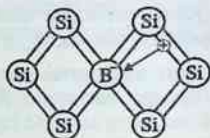
ни ҳисобга олсак, E_d нинг эВ улушларига тенг бўлган кичик қийматга эгаллигини аниқлаймиз. Демак, кри-



11.11- чизма. Саёз ва чуқур сатҳлар.



11.12- чизма. Донор киришма ўзидан электронни бўшатади.



11.13- чизма. Акцептор киришма ўзига электронни олади.

сталл панжарадаги маргумуш атомининг бешинчи валент электронини узиб олиш учун жуда кичик энергия кифоя экан. Дарҳақиқат, маргумиш тақиқланган зонада ўтказувчанлик зонасига яқин бўлган донор сатҳ E_d ҳосил қилади (11.13- чизма). Нормал шароитдаги температурада бу сатҳдаги электрон ўтказувчанлик зонасига ўтиб кетган бўлади. Натижада киришмали кремний кристаллида ўтказувчан электронлар сони кўпайиб кетади. Бундай ярим ўтказгичлар n — *тур ярим ўтказгич* деб аталади. n — турдаги ярим ўтказгичларда ўтказувчан электронлар сони соф ярим ўтказгичникидан кўп бўлади.

Энди Бор (В) атомлари киритилган кремний кристаллини кўриб чиқамиз. Бор атоми уч валентли бўлиб кремний атомлари билан ковалент бог ҳосил қилиш учун бир электрон етишмайди. Бу электронни Бор атоми қўшни кремний атомидан тортиб олиши мумкин. Бунинг учун E_a энергия керак бўлади. Юқоридаги мулоҳазаларни қайтариб E_a учун ҳам (11.28) га ўхшаш ифода ҳосил қилишимиз мумкин. E_a нинг қиймати хона температураларида 0,1 эВ га яқиндир. Бу энергия сатҳи валент зона яқинида жойлашган бўлиб *акцептор сатҳ* деб номланади. Акцептор киришмали ярим ўтказгичларда тоза ярим ўтказгичга нисбатан коваклар сони кўп бўлади. Бундай ярим ўтказгичларни ковак ўтказувчанли ёки p — *тур ярим ўтказгичлар* дейилади.

Киришма атомларининг миқдорини ошириб борсак улар кристалл панжарасида бир-бирига яқин келиб қолади, натижада уларнинг электрон тўлқин функциялари устма-уст тушиб кристалл панжарасида *киришмавий зона* ҳосил қилади. Киришма атомларининг зичлиги

$$N_k = 2,2 \cdot 10^{24} \left(\frac{m}{m_0 \epsilon} \right)^3. \quad (11.30)$$

бўлгандан бошлаб киришмавий зона ҳосил бўла бошлайди. n -тур ўтказувчанликка эга бўлган кремний учун $N_k \approx 10^{19} \text{см}^{-3}$ ни ташкил этади. Киришмавий зона ҳосил қилувчи ярим ўтказгичлар *кучли легирланган ярим ўтказгичлар* деб аталади.

Баъзи киришмалар бир неча сатҳлар ҳосил қилади, уларнинг баъзилари донор, бошқалари акцептор бўлиши мумкин. Бундай киришмалар *амфотер киришмалар* деб аталади.

Ярим ўтказгичдаги киришма сатҳлари ундаги жуда кўп ва турли туман жараёнларда муҳим ўрин тутаети. Ҳозирги замон

электроникаси учун ярим ўтказгичларга киришмалар киритиш билан улар параметрини керакли томонга ўзгартириш муҳим масалалардан биридир.

11.7. Компенсирланган ярим ўтказгичлар

Ярим ўтказгич маълум бир киришмалар киритиши натижа-сида улардаги заряд ташувчиларнинг тула зичлиги $n+r$ ни ка-майитиришимиз мумкин. Бундай камайитириш усули *компенсир-лаш* деб номланади, ярим ўтказгични эса *компенсирланган ярим ўтказгич* дейилади. Компенсирлаш ёрдамида ярим ўтказгич параметрларини керакли томонга ўзгартириш ҳозирги пайтда долзарб муаммолардан бирига айланиб қолади. Керакли хосса-га эга бўлган янги тур ярим ўтказгич модда ҳосил қилишга инсбатан легирлаш ёрдамида унинг хоссаларини ўзгартириш анча арзон ва тездир. Компенсирланган ярим ўтказгич хосса-лари компенсирлаш даражаси (K) дан ташқари, компенсир-ловчи марказлар табиатига ҳам кучли боғланган. Шунинг учун ҳозир компенсирланган ярим ўтказгичларни уч турга ажратиш мумкин.

1. Кучли легирланган компенсирланган ярим ўтказгичлар (КЛК). Бундай ярим ўтказгичларда компенсирловчи марказ сифатида бир зарядли саёз сатҳ ҳосил қилувчи киришмалар олинади.

2. Юқори энергияли зарралар оқими билан нурланган ярим ўтказгичлар. Компенсирловчи марказ сифатида турли чуқур сатҳли радиацион марказлар ва кагга ҳажмли нуқсонлар (маса-лан, тартибсизланган қисмлар (ТК)) муҳим ўрин эгаллайди.

3. Чуқур энергетик сатҳ ҳосил қилувчи киришмалар билан компенсирланган ярим ўтказгичлар. Бундай ярим ўтказгичларда катта амплитудали флукуацион потенциаллар ва тартибсизланган қисмлар бўлмайди.

11.8. Айниган ярим ўтказгич

Квант механикасида айниш деб системани турли (бир не-ча) ҳолатларига бирор физик катталиқнинг (масалан, энергия-нинг) битта қиймати мос келишига айтивлади. Ярим ўтказгичларда ўтказувчан электронлар ва коваклар зичлиги етарлича кагга бўлганда айниш кузатилади. Бунда ярим ўтказгичлар айниган ярим ўтказгичлар деб номланади. Айни-

ган ярим ўтказгичларда заряд ташувчилар Ферми-Дирак тақсимотига бўйсунлади. n — турдаги айниган ярим ўтказгичларда Ферми сатҳи (E_F) ўтказувчанлик зонасида жойлашади, p — турдаги айниган ярим ўтказгичда эса E_F вилент онада жойлашган бўлади.

n — турдаги ярим ўтказгич учун бу шартни

$$\exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \ll 1 \text{ ёки } E_F \gg 0 \quad (11.31)$$

кўринишида ёзишимиз мумкин, p - тур учун эса,

$$\exp\left[\frac{(E_g + E_F)}{kT}\right] \ll 1 \text{ ва } E_F \ll -E_g \quad (11.32)$$

бўлади. Сферик энергия зонасига эга бўлган изотроп n — тур ярим ўтказгич учун

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{E_F}{kT}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (11.33)$$

ифода ўринли бўлади.

11.9. Айнимаган ярим ўтказгич

Ўтказувчан электронлар ва коваклар зичлиги старлича кичик бўлган ярим ўтказгичларни айнимаган ярим ўтказгичлар деб номланади. Айнимаган ярим ўтказгичдаги заряд ташувчилар Максвелл-Болцман тақсимотига бўйсунлади. Айнимаганлик шарти ($E_c=0$)

$$\exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \gg 1 \quad (11.34)$$

кўринишда ёзилади. Бунда Ферми энергияси E_F тақиқланган зона ичида бўлади. Мувозанитий ҳолатдаги электронлар ва коваклар зичлиги учун қуйидаги ифодалар ҳосил қилишимиз мумкин:

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right), \quad (11.35)$$

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_g + E_F}{kT}\right). \quad (11.36)$$

$$n_0 p_0 = n_i^2. \quad (11.37)$$

Бунда $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ ва $N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ лар электрон ва коваклар учун ҳолатларнинг эффектив зичлиги деб номланади.

11.10 Ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги

Изотроп ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги учун (11.24) ифодани ҳосил қилган эдик. Хусусий ўтказувчанликда ушбу ифода қуйидаги кўринишга келади,

$$\sigma_i = (\mu_n + \mu_p) e n_i \quad (11.38)$$

(11.21) дан фойдаланиб

$$\sigma_i = 2e(\mu_n + \mu_p) \left(\frac{kT}{2\pi h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (11.39)$$

муносабатини оламиз. Кўриниб турибдики, олинган натижа металлларнинг ўтказувчанлигидан катта фарқ қилади. Ярим ўтказгичларнинг ўтказувчанлиги температура ортиши билан экспоненциал ортиб боради. Бундан ташқари ўтказувчанлик электронлар ва ковакларнинг ҳаракатчанлигига ва эффектив массаларига боғлиқ. Тақиқланган зона кенлиги E_g ярим ўтказгичларнинг ўтказувчанлигини белгилловчи муҳим омиллардан ҳисобланади. Киришмали ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги кўп омилларга боғлиқ ва мураккаб бўлганлиги учун бу ерда кўриб ўтмаймиз. Хусусий ўтказувчанликнинг температурага боғлиниши заряд ташувчилар ҳаракатчанлигининг температурага боғлинишидан келиб чиқади. Ҳаракатчанлик ўз навбатида (11.25) га мувофиқ, заряд ташувчиларнинг релаксация вақтлари τ_p ва τ_n ларга боғлиқ бўлади.

Релаксация вақти заряд ташувчиларнинг кристалл панжарасидаги сочилиш турига қараб температурага турлича боғланган. Ҳаракатчанлик ҳам мос ҳолда температурага турлича боғланади. 11.3-жадвалда $\mu(T)$ ни сочилиш турига қараб температурага боғлиниши келтирилган.

Сочилиш тури	$\mu(T) \sim$
1. Акустик тебранишлар	$T^{-3/2}$
2. Оптик тебранишлар (юқори T лар соҳаси)	$T^{-1/2}$
3. Оптик тебранишлар (паст T лар соҳаси)	$\exp(hw_{av}/kT)$
4. Киришма ионлари	$T^{3/2}$
5. Дислокациялар	$T^{-1/2}$

(11.39) дан кўриниб турибдики,

$$\sigma \sim T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

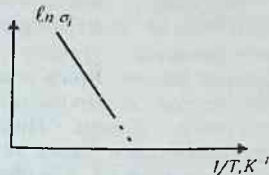
кўринишда температурага боғлиқ $T^{\frac{3}{2}}$ функция экспонентага нисбатан секин ўзгаргани учун бу боғлиқликни кўрсаткичли деб олишимиз мумкин. (11.14-чизма).

Киришмали ярим ўтказгичлар учун бундай график уч қисмдан иборат бўлади (11.15- чизма). Паст температуралардан бошлаб киришма атомлари тўлиқ ионлашиб бўлгунча электр ўтказувчанлик

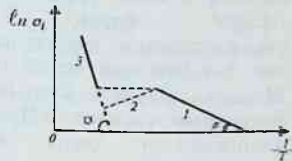
$\exp\left(-\frac{E_i}{2kT}\right)$ қонун бўйича ўзгаради.

Бунда n — тур ярим ўтказгичдаги донорлар ўз электронларини валент зонага узатади. Агар ярим ўтказгич p — тур бўлса акцептор киришмалар валент зонадан ўзига электронларни тортиб олади. (11.15- чизма).

$\sigma(T)$ графигининг иккинчи қисмида (11.15- чизма, б), киришмалар тўла ионлашган бўлади. (Яъни $n_0=N_d$ ёки $p_0=N_a$). Бунда зонадаги заряд ташувчилар зичлиги ўзгармайди. $\sigma(T)$ нинг ўзгариши тўлиқ $\mu(T)$ га боғлиқ бўлади. Температуранинг бу интервалида $\mu(T)$ камайса $\sigma(T)$ ҳам камайди, $\mu(T)$ ошса $\mu(T)$ ҳам ортади. Температура яна ортиб бориши билан ярим ўтказгич атомларининг ўтказувчанлик зонасига ўтаётган электронлар зичлиги (ёки валент зонасидаги коваклар зичлиги) киришмалар



11.14- чизма. Хусусий электр ўтказувчанлик.



11.15- чизма. Киришмали электр ўтказувчанлик.

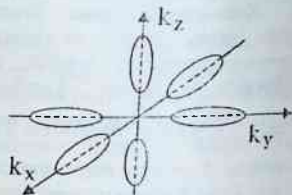
ҳосил қилган заряд ташувчилар зичлигига тенглашади ва улардан ортиб кетали. натижада хусусий ўтказувчанлик етакчи рол ўйнайди (11.15- чизма, с). Бунда $\sigma = \sigma_0 \exp(-\frac{E_g}{2kT})$ қонунига ўринли бўлади. Бу ифодалар киришмалар зичлиги унча катта бўлмаган ҳоллар учун ўринлидир.

11.11. Ярим ўтказгичларда циклотрон резонанс

Металларда циклотрон резонанс ҳодисаси металл сиртига яқин бўлган электронларда кузатилади. Чунки скин-эффект электромагнит тўлқинларни металл ичкарисига киришга ҳалақит беради. Ярим ўтказгичларда эса барча заряд ташувчилар ташқи электромагнит тўлқинининг ўзгарувчан майдони таъсирида бўлади. Циклотрон резонанс ёрдамида ярим ўтказгичлардаги заряд ташувчиларининг эффектив массасини аниқлаш мумкин. Монокристалл ярим ўтказгичларда эффектив масса қиймати йўналишга боғлиқ бўлади.

Ярим ўтказгичларда турли йўналишлардаги эффектив массалар фарқи 10 мартадан ҳам кўп бўлиши мумкин. Эффектли массалар фарқи ярим ўтказгичларнинг энергетик зоналар тузилишидан келиб чиқади. Масалан, Ge ва Si учун бир хил энергияли сиртлар ($E(p)=const$) эллипсоидлар ҳосил қилади. (11.16- чизма).

Улар учун энергияни



11.16- чизма. Кремний учун тенг энергияли сиртлар — эллипсоидлар бўлади

$$E(p) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_i} + \frac{p_z^2}{2m_{||}} \quad (11.40)$$

кўринишида ёзишимиз мумкин. Кремний монокристаллидаги [100] йўналиши эллипсоиднинг симметрия ўқига мос тушади. Бу йўналишдаги эффектив масса $m_{||}$ билан белгиланган, унга қўндаланг икки йўналишда эффектив массалар тенг бўлиб, улар m_i кўринишида ёзилган. Агар ташқаридан қўйилган лонм-ний магнитик майдон В йўналиши эллипсоидга ўқига параллел бўлса, заряд ташувчилар бу магнит майдонда

$$\omega_{\perp} = \frac{eB}{m_{\perp}} \quad (11.41)$$

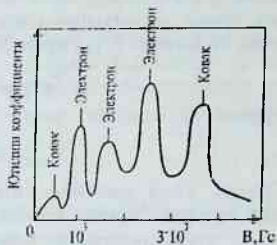
такрорийлик билан айлана бошлайдилар. Майдон йўналиши эллипсоид ўқиغا тик бўлса,

$$\omega_{\parallel} = \frac{eB}{m_{\parallel}} \quad (11.42)$$

Агар магнит майдон эллипсоид ўқи билан θ бурчак ҳосил қилса, циклотрон резонанс ёрдамида аниқланган эффеќтли масса учун

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)^2 = \frac{\cos^2 \theta}{m_{\perp}^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_{\parallel} m_{\parallel}} \quad (11.43)$$

муносабат ўринли бўлади. Ge монокристалли учун циклотрон резонанс ютилиши (11.17) чизмада келтирилган. Бунда магнит майдон йўналиши [100] билан 60° ҳосил қилади. Ташқаридан тушаётган электромагнит тўлқин такрорийлиги ~ 24 ГГц атрофида, температура $T=4$ К. Ютилиши юқори бўлган чўќқилар икки хил эффеќтив массали ковак ва уч хил эффеќтли массали электронлар бор эканлигини кўрсатади.



11.17- чизма. Ярим ўтказгичларда циклотрон резонанс.

Ҳар бир эффеќтли масса ташқи майдонга маълум бир бурчак остида йўналган эллипсоид энергетик зонага мос келади. Ушбу тажрибалардан Ge учун $m_{\perp}=0.082 m_0$ ва $m_{\parallel}=1.59 m_0$ эканлиги аниқланган. Бунда m_0 — электроннинг гравитацион массаси, Si учун эса $m_{\perp}=1.19 m_0$ ва $m_{\parallel}=0.98 m_0$ ни ташкил этади. Ge ва Si ларнинг валент зоналари чети мураккаб кўринишга эга. Тажрибалар у ерда икки хил массали коваклар борлигини кўрсатади.

Улар енгил ва оғир эффеќтли массали коваклар деб номланган. 11.4-жадвалда баъзи ярим ўтказгич монокристаллари учун электрон ва ковакларнинг инебий эффеќтив массалари келтирилган.

Кристалл номи	Тақиқланган зона кенглиги $E_g, \text{эВ}$	Электроннинг эффективли массаси (m_n^*/m_0)	Оғир ковалентнинг эффективли массаси (m_p^*/m_0)	Енгил ковалентнинг эффективли массаси (m_{p2}^*/m_0)
InSb	0,23	0,0155	0,4	0,016
InAs	0,36	0,024	0,41	0,026
GaSb	0,81	0,042	-	0,052
GaAs	1,52	0,07	0,68	0,07

Электронларнинг ва енгил ковалентларнинг эффективли массалари тақиқланган зона кенгайишига пропорционал ҳолда ортиб боради. Ушбу эффективли массалар Бриллюэн зонасининг марказидаги ($k=0$) қийматга мос келади.

11.12. Ярим ўтказгичларда Холл ҳодисаси

Холл ҳодисасининг таърифини Х бобда келтириб ўтган эдик. Ярим ўтказгичларда Холл ҳодисаси ёрдамида заряд ташувчилар зичлигини аниқлашимиз мумкин. Металллардан фарқли ўлароқ ярим ўтказгич n – тур бўлса Холл коэффициенти

$$R_n = -A_n / en; (A_n = 1 \div 2) \quad (11.44)$$

кўринишда ёзилади, агар p –тур ярим ўтказгич бўлса

$$R_p = A_p / ep; (A_p = 1 \div 2) \quad (11.45)$$

бўлади. Холл доимийсининг ишораси асосий заряд ташувчилар ишорасига мос келади. Демак, Холл ҳодисаси ёрдамида ярим ўтказгичлардаги асосий заряд ташувчилар ишорасини ҳам аниқлашимиз мумкин.

$$\mu_H \equiv |R_n| \sigma_n = A \mu_n \quad (11.46)$$

катталиқ Холл ҳаракатчанлиги деб аталади. У дрейф ҳаракатчанлиқ – μ_n дан фарқ қилади. A_n , A_p ва A ўлчовсиз катталиқлар бўлиб, Холл фактори деб номланади. Уларнинг қиймати ҳар бир хусусий ҳол учун заряд ташувчиларнинг сочилиш механизмларидан келиб чиқади. Масалан, агар ҳамма электронлар бир хил тезликда ҳаракатланса $A=1$ бўлади.

Сочилиш асосан фононларда содир бўлган ва айнамаган ярим ўтказгич учун $A=3n/8=1.18$ деб олинади. Агар ярим ўтказгичдаги бир хил энергияли ($E(p)=\text{const}$) сиртлар кўриниши сферадан катта фарқ қилса $A=0,7$ қийматгача камайиши мумкин. Зарядли марказларда сочилиш механизми устувор бўлганда $A \geq 1.9$ бўлиши мумкин.

11.13. Магнитик қаршилик ҳолиевси

Токли ярим ўтказгичнинг ток йўналишининг тик йўналишига B магнит майдонга киритсак, ярим ўтказгичнинг электор қаршилиги ортади. Солиштирма электор қаршилик ρ магнит майдон йўқлигида $\rho(0)$ га тенг бўлса, у ҳолда солиштирма қаршиликнинг нисбий ўзгариши

$$\frac{\Delta\rho}{\rho(0)} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{B^2}{\tau^2} \left\{ \left(\frac{ne^3}{m_n^2} \right)^2 / \bar{\tau}_n \bar{\tau}_n^3 - (\bar{\tau}_n^2)^2 / + \left(\frac{pe^3}{m_p^2} \right)^2 / \bar{\tau}_p \bar{\tau}_p^3 - \right. \\ \left. - (\bar{\tau}_p^2)^2 / + \left(\frac{npe^4}{m_n m_p} \right) / \left(\frac{e}{m_p} \right)^2 \bar{\tau}_n \bar{\tau}_p^3 + \left(\frac{e}{m_n} \right)^2 \bar{\tau}_p \bar{\tau}_n^3 \right\}. \quad (11.47)$$

Бу муносабатдаги $\bar{\tau}_p$ ва $\bar{\tau}_n$ лар мос ҳолда коваклар ва

электронларнинг релаксация вақти, m_n ва m_p лар эффектли масса-лар. Бу ифодани баъзи хусусий ҳолларда бир мунча содда кўринишга келтириш мумкин. Масалан, донор киришмали n - тур ярим ўтказгич учун

$$\frac{\Delta\rho}{\rho(0)} = \left(\frac{eB}{m_n} \right) \frac{\bar{\tau}^3 \bar{\tau} - (\bar{\tau}^2)^2}{(\bar{\tau})^2} \quad (11.48)$$

бўлади. (11.47) дан кўриниб турибдики магнитик қаршилик майдонга $T \sim B^2$ кўринишда боғланган экан.

11.14. Ярм ўтказгичларда диффузион ток

Агар ярим ўтказгичларда электронлар ёки коваклар зичлигининг градиенти (фарқи) ҳосил қилинса, яъни n ёки p ярим ўтказгичнинг бир қисмида кагтароқ бошқа қисмида эса кичикроқ бўлса, ярим ўтказгич буйлаб диффузион ток оқади. Бунда заряд ташувчилар зичлиги кагтароқ бўлган жойдан, зичлиги кичикроқ бўлган жойга қараб ҳаракатланади. Диффузион ток ярим ўтказгичлар учун хос бўлган ҳолиевси бўлиб, металлларда кузатилмайдди. Диффузияю ток ҳосил қилиниши учун танки электорик майдон бўлиши икерт эмас. Ярм ўтказгичда x - охи буйлаб заряд ташувчилар градиенти ҳосил қилинган бўлса, у ҳолда ярим ўтказгичдан утаётган ток зичлиги заряд ташувчилар зичлигининг пропорционал бўлади:

$$j_{nx} = eD_n \frac{dn}{dx}, \quad (11.49)$$

$$j_{px} = -eD_p \frac{dp}{dx}. \quad (11.50)$$

Бу ифодаларни уч ўлчовли ҳол учун умумлаштириб,

$$\vec{j}_n = eD_n \nabla n, \quad (11.51)$$

$$\vec{j}_p = -eD_p \nabla p,$$

муносабатларни ҳосил қиламиз. Бунда D_n ва D_p лар мос ҳолда электрон ва ковакларнинг диффузия коэффициентлари дейилади. Ушбу катталикларни Эйнштейн биринчи марта температура билан боғлианишини кўрсатиб берди:

$$\begin{cases} D_n = \mu_n \frac{kT}{e}, \\ D_p = \mu_p \frac{kT}{e}. \end{cases} \quad (11.52)$$

Булар Эйнштейн муносабати деб юритилади. Агар ярим ўтказгичга электр майдон ҳам қўйилган бўлса, тўлиқ ток зичлиги дрейф ва диффузион тоқлар зичлигидан ташкил топади.

$$\vec{j}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n, \quad (11.53)$$

$$\vec{j}_p = ep\mu_p \vec{E} + eD_p \nabla p. \quad (11.54)$$

Ушбу муносабатлар унча катта бўлмаган электр майдонлар учун ўринлидир. Агар ярим ўтказгичда электроннинг эркин югириш масофаси $\bar{\ell}$ бўлса, шу масофада электроннинг олган энергияси $eE\bar{\ell}$ бўлади.

$$eE\bar{\ell} \ll kT \quad (11.55)$$

бўлган ҳоллар учун (11.53) ва (11.54) муносабатлар ўринли бўлади. Акс ҳолда Ом қонуни бузилиб электронларнинг ҳаркатчанлиги μ_n ҳам E га боғлиқ бўлиб қолади.

11.15. Ярим ўтказгичларнинг магнит хоссалари

Кўп ярим ўтказгичлар диамагнитлар ҳисобланади. Нормал шароитда улар кучсиз диамагнит хоссасига эга бўлади. Лекин, баъзи парамагнит ўзгаришлар натижасида уларда парамагнит

хоссалари устивор бўлиши мумкин. Бундай ярим ўтказгичларни номагнит яримўтказгичлар деб аталади. Бундай ярим ўтказгичларда d ёки f атом қобиклари тўлмаган, киришмалари йўқ, ёки жуда кам миқдорда бўлган Si , Ge , CdS , CdSe , CdTe ва бошқа ярим ўтказгичлар мисол бўла олади. d ва f — атом қобиклари тўлмаган, киришмалари бор ярим ўтказгичлар $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ ҳам мисол бўла олади. Бунда x -индекс d ва f қобиклари чала тўлган Mn ва Fe киришмаларининг нисбий улуши. Ушбу ярим ўтказгичларда Mn ва Fe киришмаларининг атомлари бир-бирлари билан кучли таъсирлашадилар ва етарлича кўп атомларнинг магнит моментлари бирлашиб магнит доменлари (зарралари) ҳосил қиладилар. Бундай ярим ўтказгичлар ферромагнит ва антиферромагнит хоссаларини намоён қиладилар. Ярм ўтказгичнинг асосий кристалл панжарасини ташкил этган атомлар магнит моментига эга бўлса, уларни магнит ярим ўтказгичлар дейилади. (Масалан, NiO , Fe_3O_4 , EuO , EuS , EuSe , EuTe ва ҳ.к.).

Номагнит ярим ўтказгичларнинг магнит қабулчанлиги 3 та қисмдан иборат бўлади.

$$\chi = \chi_1 + \chi_2 + \chi_3 \quad (11.56)$$

Бунда χ_1 — кристалл панжарасининг, χ_2 — заряд ташувчиларнинг, χ_3 — нуқсонларнинг магнит қабулчанлиги. Тоza ярим ўтказгич монокристаллнинг тажрибада ўлчанган қабулчанлиги χ_1 ни ташкил этади. Заряд ташувчиларнинг қабулчанлиги χ_2 парамагнит χ_{2n} ва диамагнит χ_{2d} ташкил этувчилардан иборат. Одатда $\chi_{2n} \gg \chi_{2d}$ бўлгани учун $\chi_2 \approx \chi_{2n}$ деб олинади. Парамагнит қабулчанлик учун

$$\chi_{2n} = AT^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-E_g}{2kT}\right) \quad (11.57)$$

ифода ўринли бўлиб, T температурага кучли боғланган. χ_3 ни асосан сийрак жойлашган узаро таъсирлашмайдиган магнит киришмалар аниқлайди. Бундай киришманинг магнит хосса-сини қўйидаги ортикча электроннинг спини белгилайди. Ушбу ҳолда қабулчанлик учун

$$\chi_{3n} = \frac{n_k \mu_B}{H} L(\alpha) \quad (11.58)$$

Ланжевен ифодаси ўринли бўлади. Бунда

$\alpha = \mu_B / kT$; $L(\alpha) = c/h\alpha - 1/\alpha$ ва n_k киришмадаги ортиқча электронлар зичлиги.

Агар киришмалар миқдори кўп бўлиб, улар киришмавий зона ҳосил қилса, бундай донорларнинг парамагнит қабулчанлиги

$$x_{3n} = c/T^{1-a} \quad (11.59)$$

бўлади. Бунда

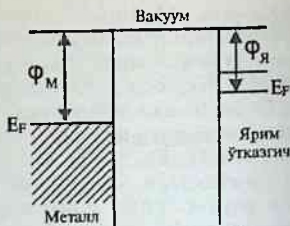
$c = n_k \mu_B (A/m^3)^a (1+a)^{-1}$, $a = n_k (Bm^3)$; A ва B лар доимий катталиклар. x_{3n} га ўтиш металлари киришмалари катта ҳисса қўшади (Fe ва бошқалар).

11.16. Ярим ўтказгичларда контакт ҳодисалар. Металл-ярим ўтказгич контакти

Ярим ўтказгичда электр токи ўтказиш учун уни электр манбадан келган металл ўтказгич билан туташтириш (яъни, контактлаш) керак. Натижада металл — ярим ўтказгич контакти ҳосил бўлади. Ярим ўтказгичли асбобларнинг деярли барчаси ярим ўтказгичларнинг металл, ярим ўтказгич, диэлектрик билан контакт ҳосил қилиниши натижасида яратилади. Шунинг учун контакт ҳодисаларини ўрганиш муҳим аҳамиятга эга. Қуйида металл билан ярим ўтказгич контактини кўриб чиқамиз. Металл сиртидан иссиқлик ҳаракати таъсирида чиқаётган электронлар оқими учун (10.79) ифода ҳосил қилинган эди.

Ундаги ϕ — термодинамик чиқиш иши деб номланади ва у Ферми сатҳидан вакуум сатҳигача бўлган энергетик масофани билдиради. (11.18- чизма).

Металл ва ярим ўтказгичлар алоҳида вакуумда жойлашганда уларнинг ҳар биридан қуйидаги ифодалар билан аниқланувчи эⁿ электронлар оқими ҳосил бўлади.



11.18- чизма. Металл-ярим ўтказгич контакти.

$$J_{Я} = \frac{4\pi m(kT)^2}{h^3} \exp\left(-\frac{\varphi_{Я}}{kT}\right),$$

$$J_{М} = \frac{4\pi m(kT)^2}{h^3} \exp\left(-\frac{\varphi_{М}}{kT}\right). \quad (11.60)$$

Энди ярим ўтказгич билан металлни туташтирамиз. 11.18 - чизмада кўрсатилган ҳол учун $\varphi_{м} > \varphi_{я}$, бинобарин $J_{я} > J_{М}$ бўлади. Демак, бир хил температурада ярим ўтказгичдан металлга ўтаётган электронлар сони металлдан ярим ўтказгичга ўтаётган электронлар сонидан катта бўлади. Натижада металл сирти манфий, ярим ўтказгич сирти эса мусбат зарядланиб қолади. Контактда электр майдон ҳосил бўлади ва бу майдон $J_{я}$ ва $J_{М}$ оқимлар фарқига тенг тесқари оқим ҳосил қилмагунча ортиб боради. Электронлар оқими мувозанатлашганда контактаги электр майдон энергияси $\varphi_{к}$ чиқиш ишлари айирмасига тенг бўлади.

$$\varphi_{к} = \varphi_{М} - \varphi_{Я} \quad (11.61)$$

Майдон металл ичкарасига кирмайди, у ярим ўтказгич сиртига яқин қатламда ҳосил бўлади (11.19-чизма).

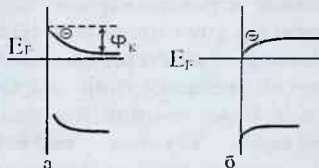
а) Ярим ўтказгичдан металлга ўтган электронлар ҳисобига ярим ўтказгичда электронлар зичлиги камаяди ва энергия зонаси юқорига эгриланади. Ярим ўтказгичнинг ҳажмида n_0 ва сиртидаги n электронлар зичлиги

$$n = n_0 \exp(-\varphi_{к}/kT) \quad (11.62)$$

кўринишда боғланган бўлади.

Бундай қатламнинг солиштирма қаршилиги катта бўлганлиги учун уни беркитувчи қатлам дейилади. Агар $\varphi_{М} < \varphi_{к}$ бўлса, у ҳолда $J_{М} > J_{я}$ ва металл сирти мусбат, ярим ўтказгич сирти манфий зарядланади. Энергия зонаси пастга эгриланади (11.19- чизма, б).

Беркитувчи қатламнинг мувозанат шароитдаги кенглиги:



11.19- чизма Металл-ярим ўтказгич контактида беркитувчи ва беркитмайдиган қатламларнинг пайдо бўлиши.

$$L = \left(\frac{E\varphi_k}{2\pi e^2 n_0} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (11.63)$$

Беркитувчи қатламли металл-ярим ўтказгич контактлари ўзгарувчан ток тўғрилагичлари бўлиб хизмат қила олади. Шундай контактнинг металл қисмига мусбат қутб, ярим ўтказгич қисмига манфий қутб уланган V кучланишли электр токи манбаини кўриб чиқамиз. Бундай уланишда контакт потенциаллар айирмаси камаяди:

$$\varphi = \varphi_k - eV. \quad (11.64)$$

Ярим ўтказгичдан металлга томон ҳаракатланаётган электронлар учун потенциал тўсиқ пасаяди, электронлар оқими ортиб кетади. Агар занжир берк бўлса доимий ток ҳосил бўлади. Токнинг қиймати кучланиш ортиши билан жуда тез, кўрсаткичли функция сингари ортиб боради (11.20-чизма). Бундай кучланишни *тўғри кучланиш* деб номланади. Контакт қатлам кенглиги ҳам (11.63) га мувофиқ камаяди:



11.20- чизма. Металл-ярим ўтказгич контактнинг вольт-ампер тавсифномаси

$$L(V) = \left[\frac{E(\varphi_k - eV)}{2\pi e^2 n_0} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (11.65)$$

Энди контактдаги металлга манфий, ярим ўтказгичга мусбат қутбни улаймиз. Бундай кучланиш *тескари кучланиш* деб аталади. У ҳолда контактдаги потенциал тўсиқ баландлиги ортади:

$$\varphi = \varphi_k + e|V|. \quad (11.66)$$

Электронларнинг ярим ўтказгичдан металлга томон оқими камаяди. Металлдан ярим ўтказгичга томон электронлар

оқими ўзининг кичик қийматига қолаверади. Бу эҳтимол фарқидан ҳосил бўлган ток жуда кичик бўлиб, шоттки янги дейилади. Тескари қучланиш ортиб борган сари шоттки қағлами ҳам кенгайиб боради, электронлар оқими эса ўсмайтилади. *Тўғри ток* тескари токдан бир неча тартиб янги бўлади.

Шунинг учун, айтиш мумкинки, беркатувчи металл — ярим ўтказгич контакти токни бир томонга яқини ўтказди, тескари томонга эса деярли ўтказмайди. Бундай контакт Шоттки контакти деб номланиб, тўғрилагич, яъни диод вазифасини бажариши мумкин. Уларни Шоттки диодлари деб аталади. Шоттки контакти икки сиртининг туташishiдан иборат, шунинг учун у муайян электр сизимга эгадир.

$$C = \frac{\epsilon}{4\pi L} = \left(\frac{e^2 n_a}{8\pi \varphi_k} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (11.67)$$

Ташқи электр манбага уланганда ушбу ифодадаги φ манба қучланишига боғлиқ бўлади, у ҳолда (11.64) га мувофиқ:

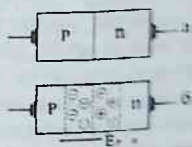
$$C = \left[\frac{e^2 n_a}{8\pi (\varphi_k - eV)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (11.68)$$

Демак контактининг сизими ташқи қучланишга боғлиқ эса. Барикаплар деб номланувчи асбобларнинг ишлаш тамойили ана шундай қучланиш билан бошиқариладиган электр сизимларга асосланади.

Электрон — ковак (p-n) ўтиш

Ярим ўтказгич моддасидан маълум бир усуллар билан p ва n турли соҳалар ҳосил қиламиз. Бу соҳаларни бир-бири билан туташтирхак p-n ўтиш ҳосил бўлади (11.21- чизма). Электронлари қўй n — соҳанинг чегарига яқин қатламидан электронлар диффузияланиб p — соҳага ўтиб кетади,

p — соҳадан n — соҳага эса коваклар диффузияланади. Диффузияланган электронлар ва коваклар ярим ўтказгич ичига қарай рекомбинацияланади (яъни, йўқолади). Чегара қатламидан эса ҳаракатсиз манфий акцептор ва мусбат донор йонлари қолади.



11.21- чизма. Электрон-ковак (p-n) ўтиш.

Ҳосил бўлган ҳажмий заряд соҳасида электр майдон n – соҳадан p – соҳага томон йўналади (11.21- чизма, б).

Бу майдон таъсирида вужудга келган зарядлар оқими диффузион оқимларга тенг бўлганда $p-n$ ўтишнинг электр майдони ўзининг мувозанатий қийматига эришади. p ва n соҳаларнинг қатлам кенгликлари мос ҳолда,

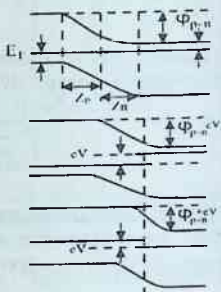
$$Z_n = \left(\frac{\varepsilon \varphi_{p-n}}{2\pi e^2 N_d} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad Z_p = \left(\frac{\varepsilon \varphi_{p-n}}{2\pi e^2 N_a} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (11.69)$$

ифодалар билан аниқланади. $p-n$ ўтишнинг умумий кенглиги:

$$Z = \left(\frac{\varepsilon \varphi_{p-n}}{2\pi e^2} \cdot \frac{N_d + N_a}{N_d N_a} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (11.70)$$

бўлади. Кўриниб турибдики, $p-n$ ўтиш иккала соҳага ҳам кириб борар экан. $p-n$ ўтишда ҳаракатчан электронлар ва коваклар диффузия натижасида қатламдан кетиб қолганлиги туфайли қўзғалмас акцептор (манфий) ва донор (мусбат) ионлар ҳажмий заряд ҳосил қилади. Ҳажмий заряд ҳисобига электр майдон вужудга келади. Бу электр майдон ковакларнинг диффузион оқимига қарши уларнинг дрейф оқимини ҳосил қилади. Мувозанат ҳолатида диффузион ва дрейф оқимлари тенг бўлиб ток кучи 0 га тенг бўлади.

Токда қатнаша оладиган ҳаракатчан зарядлар зичлиги $p-n$ ўтишда жуда кичик бўлади, шунинг учун $p-n$ ўтишнинг солиштирма қаршилиги жуда каттадир. $p-n$ ўтишда электр майдон билан боғлиқ бўлган потенциал φ координата функцияси бўлади. Унинг $p-n$ ўтиш четлари орасидаги қийматлари айирмаси *контакт потенциаллар фарқи* ёки *потенциал тўсиқ баландлиги* φ_{p-n} ни билдиради. Электр майдон n – тур соҳадан p – тур соҳага йўналгани учун, n – тур соҳадан электронларнинг p – тур соҳага



11.22- чизма. Электрон-ковак ўтишга тўғри ва тескари кучланиш берилган ҳоллар.

Ўтишига ва p – тур соҳа ковакларининг n – тур соҳага ўтишига тўсиқ бўлади (11.22- чизма, а).

Энди n - p ўтишга ташқи v – кучланиш қўямиз. p - n ўтиш соҳасининг қаршилиги катта бўлганлиги учун, деярли барча кучланиш тушиши p - n ўтишга тўғри келади. Агар ташқи манбанинг мусбат қутби p – тур соҳага, манфий қутби n – тур соҳага уланган бўлса, тўғри кучланиш қўйилган бўлади (11.22- чизма, б). Унда потенциал тўсиқ ϕ – пасаяди ва тўғри ток пайдо бўлади.

Мусбат қутб n – тур соҳага, манфий қутб p – тур соҳага уланса (11.22- чизма, в), p – n ўтишнинг майдони билан ташқи майдон бир хил йўналган бўлади. Потенциал тўсиқ ортади, p - n ўтишдан жуда кичик тескари ток оқади. Катта бўлмаган кучланишлар ва тоқлар соҳасида p - n ўтишнинг вольт–ампер характеристикаси учун

$$j = e \left(\frac{D_p p_n}{L_p} + \frac{D_n n_p}{L_n} \right) (e^{eV/kT} - 1) = j_s (e^{eV/kT} - 1) \quad (11.71)$$

ифода ўринли бўлади. Бунда D_p , D_n коваклар ва электронларнинг диффузия коэффициентлари; L_p , L_n – мос ҳолда диффузия узунликлари; p_n – ковакларнинг n – тур соҳадаги, n_p – электронларнинг p – тур соҳадаги мувозанатий зичликлари.

Тўғри кучланиш ($V > 0$) қўйилганда ток зичлиги экспоненциал ортиб боради. Тескари кучланишда ($V < 0$) ток жуда секин ўсади ва $\exp(eV/kT) \ll 1$ бўлганда ўзининг кичик тўйинган қийматига эришади. Демак p - n ўтиш ҳам тўғрилаш хоссасига эга экан, яъни бир йўналишда токни яхши ўтказади, иккинчи йўналишда эса деярли ўтказмайди. p - n ўтишнинг кенглиги ташқи кучланишга қўйилдигича боғланган.

$$Z(V) = \left[\frac{\epsilon(\phi_{p-n} - eV)}{2pe^2} \cdot \frac{N_d + N_a}{N_d N_a} \right]^{1/2} \quad (11.72)$$

p - n ўтишнинг ҳам сигими бўлиб, унинг қиймати ташқи кучланишга боғлиқ;

$$C = \left[\frac{\epsilon e^2}{8\pi(\varphi_{p-n} - eV)} \cdot \frac{N_d N_a}{N_d + N_a} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Ушбу ифодалар кучланиш тушини $p-n$ ўтишда содир бўлаётган ҳоллар учун ўринлидир. Кичик кучланишларда бу шарт бажарилади.

Шундай қилиб $p-n$ ўтиш ўзгарувчан кучланишни тўғрилаш ва электр сигимни кучланиш билан бошқариш хоссаларига эга экан. Ушбу ва яна бошқа бир қатор хоссалардан фойдаланган ҳолда ҳозир ярим ўтказгичлардан жуда кўп асбоблар тайёрланмоқда. Мураккаб интеграл микро-схемаларида $p-n$ ўтишлар асосий элементлар бўлиб хизмат қилади.

Саволлар ва масалалар

1. Ярм ўтказгичларнинг қандай турлари мавжуд?
2. Ярм ўтказгичларнинг энергетик зоналари тузилишини тушунтиринг.
3. Ярм ўтказгич хоссаларига киришмалар қандай таъсир кўрсатади?
4. $p-n$ ўтишнинг тўғрилаш хоссасини тушунтириб беринг.
5. Температураси 400 К бўлган хусусий ярм ўтказгичда электронлар зичлиги $n=1,38 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Электрон ва ковакларнинг эффектив массалари кўпайтмасини топинг. Тақиқланган зона кенглиги $E_g=0,785 \cdot 4 \cdot 10^{-4}$. Т(эВ) қонуният бўйича ўзгаради.
6. Энергияси $E(k)=E_c+(\hbar k)^2/2m^*$ ифода билан аниқланган бир ўлчовли, айнамаган электрон гази учун ҳолатлар зичлиги $g(E)$ топилин.
7. Бор (В) атоми киритилган ($N_a=10^{17} \text{ см}^{-3}$) кремнийдаги коваклар зичлиги топилин. $T=300^\circ \text{ К}$, $m_p^*=0,59 m_0$, $\mu_p=100 \text{ см}^2 \text{ Вс}^{-1}$ ва $g_0=1$. Бор атомлари учун $E_V=+0,045 \text{ эВ}$.

8. Ярим ўтказгичдаги электронлар зичлиги $T=400^{\circ}\text{K}$ да $n=1,30 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $T=350^{\circ}\text{K}$ да $n=6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ бўлса, тақиқланган зона кенглиги E_g ни аниқланг. E_g температура га чизиқий боғланган деб ҳисобланг.

9. Тоза германийдаги электронлар ҳаракатчанлиги $T=300^{\circ}\text{K}$ да $\mu_n=3800 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$. $m_n^*=0,55m_0$ ва $\mu=aT^{3/2}$ бўлса, германийнинг $T=300^{\circ}\text{K}$ даги солиштира қаршилигини топинг. $E_g=0,785-4 \cdot 10^{-4}T$ қонуният бўйича ўзгаради, $\mu_n/\mu_p=2,1$ ва a - доимий катталиқ деб олинсин.

ХИ БОБ

ДИЭЛЕКТРИКЛАР

Диэлектрик сўзи юнонча *dia* — орқали ва инглизча *elektrik* — электр сўзларидан тузилган.

«Диэлектрик» атамасини Фарадей электр майдон кирадиган моддаларни аташ учун киритган. Диэлектриклар электр токини ёмон ўтказида. Ионланмаган барча газлар, баъзи бир суюқликлар ва қаттиқ жисмлар диэлектриклар бўлади. Металларнинг солиштирма электр ўтказувчанлиги $\sigma \sim 10^8 - 10^6 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ тартибда, диэлектрикларники эса $10^{-10} - 10^{-15} \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ тартибда бўлади. Бу тафовутни классик физика металлларда эркин электронлар бўлади, диэлектрикларда эса барча электронлар боғланган бўлиб, уларни электр майдон ўз атомларидан ажратиб ололмайди, балки бироз силжитида деб тушунтирар эди. Қаттиқ жисмларнинг квант физикаси (V бобга қаранг) электронлар энергия зоналарининг турлича тўлдирилганлигидан қаттиқ жисмларнинг электр, оптик ва бошқа кўп хоссалари келиб чиқишлигини тушинтириб бера олди. Хусусан диэлектрикларда валент зоналар тўла тўлдирилган бўлиб, уларнинг юқорисидаги бўш зона тўлдирилган зонадан анча юқорида жойлашган, тўла тўлдирилган зона электронлари электр ўтказувчанликда қатнаша олмайди, уларнинг бўш зонага ўтиб олиб, ўтказувчанликда қатнаша олиши учун енгиб ўтилиши зарур бўлган энергетик тўсиқ (тақиқланган зона кенглиги) анча катта, бундай ўтиш имконияти, одатда жуда кичик, шунинг учун диэлектриклар электр токини деярли ўтказмайди. Уларда электр майдон электронлар зичлигини қайта тақсимлайди (атом ва молекулалар ичида электронларни силжитида) — қутбланиш ҳодисасини юзага келтиради.

Зоналар назариясига асосан, диэлектриклар билан яримўтказгичлар орасидаги фарқ юқориги тўлдирилган зона билан бўш зона орасидаги тақиқланган зона кенглигининг ҳар

хил бўлишигидан иборат. Яримўтказкичларда $E_g < 3\text{эВ}$, диэлектрикларда $E_g > 3\text{эВ}$ деб шартли ҳисобланади.

Диэлектрикларда зарядларнинг эркин қўчиши мумкин бўлмаганлиги туфайли унинг ичкарига етарлича кучли ташқи электр майдонлар кира олади. Бунда кристалл панжарасининг даврий электр майдонига қўшимча (ташқи) майдон қўшилганда унга муҳим ҳолат диэлектрикнинг ички тузилишининг (электронлар ва ионлар вазиятларининг) ўзгаришини аниқлаш имконини бериши мумкин.

Агар диэлектрик намунасини статик электр майдонга (масалан, конденсатор пластиналари орасидаги майдонга) жойлаштирилса, кристаллнинг статик диэлектрик синдирувчанлиги ϵ_0 ни аниқлаб, кристаллнинг ички тузилиши ўзгариши ҳақида муҳим маълумот олиши мумкин. ϵ_0 ни микроскопик назария ҳисоблайди.

Диэлектрикнинг оптик хоссаларини, яъни унинг юқори такрорийликни электромагнит майдон билан ўзаро таъсирини аниқлаш учун диэлектрик синдирувчанликнинг такрорийликка боғлиқлигини, яъни $\epsilon = \epsilon(\omega)$ ни ҳисоблаш зарур. Бундан синдириш қўрсаткичи $n = \sqrt{\epsilon}$ ни аниқлаш мумкин.

Ионлар кристалларида ҳатто ташқи майдонлар бўлмаганида ҳам ионлар орасида узоқ таъсир электростатик кучлар мавжуд бўлиши мумкин. Бу кучлар панжара ўзининг мувазанатий шаклига нисбатан деформацияланиши (масалан, атомлар тебранишлари) оқибатида пайдо бўлиши мумкин.

Мазкур масалаларни тадқиқлашда муҳит учун ёзилган Максвелл тенгламаларидан фойдаланиш қулайдир. Кейин қаттиқ жисмдаги маҳаллий майдонларни муҳомамага киритиб, ташқи майдон таъсирида қўбланиш ҳолисаларини атомлар савиясида баён қилинади.

12.1. Диэлектрикларга онд асосий тушунчалар ва катталиклар

Маълумки, классик электродинамика муҳимлардаги электромагнит ҳолисаларини, ташқи майдондан ташқари, яна муҳит хоссаларини ифодаловчи тушунча ва катталиклар ёрдамида тадқиқ қилган.

\vec{E} — электр майдон кучланганлиги — майдоннинг мазкур нуқтасига жойлантирилган бирлик мусбат зарядга таъсир этувчи куч:

\vec{P} — қутбланиш вектори — диэлектрик бирлик ҳажмининг электр моменти;

\vec{D} — электр индукция (электр силжиш) вектори муҳит ичида ташқи майдон ва унинг таъсирида пайдо бўлган қутбланиш электр майдонининг биргаликда бирлик мусбат зарядга таъсир этувчи куч;

ϵ — муҳитнинг нисбий диэлектрик сингдирувчанлиги (диэлектр доимий) — Гаусс бирликлар системасида изотроп муҳитда \vec{D} ва \vec{E} орасида пропорционаллик коэффициенти $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$;

ϵ_0 — вакуумнинг электр доимийси, $\epsilon_0 = (10^7/4\pi c^2) = 8,8542 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Изотроп муҳитда Гаусс системасида

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} = \epsilon\vec{E} \quad (12.1)$$

ёки

$$\vec{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \vec{E}. \quad (12.2)$$

χ — нисбий диэлектрик қабулчанлик \vec{P} қутбланиш вектори билан электр майдон кучланганлиги орасидаги пропорционаллик коэффициенти

$$\vec{P} = \chi \vec{E} \quad (12.3)$$

(12.2) ва (12.3) ифодалардан

$$\chi = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \dots \text{ёки} \dots \epsilon = 1 + 4\pi \chi \quad (12.4)$$

келиб чиқади.

СИ бирликлар системасида (12.1) ўрнига

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 (1 + \chi) \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E} \quad (12.5)$$

(бунда $\epsilon = 1 + \chi$) ифода ёзилади.

Анизотроп муҳит бўлганида P ва E векторлар параллел бўлмаслиги мумкин, диэлектрик қабулчанлик ва сингдирувчанлик тензор катталиклар бўлади.

Максвеллнинг қуйидаги тенгламасини эслатамиз:

$$\text{div} \vec{D} = 4\pi \rho \quad (\text{СИ да } \text{div} \vec{D} = \rho) \quad (12.6)$$

Изотроп муҳитда

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{4\pi}{\epsilon} \rho \quad (\text{СИ да } \operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0}). \quad (12.6')$$

Маълумки, мазкур тенглама Кулон қонунини ρ зичликда узлуксиз тақсимланган зарядлар ҳоли учун умумлаштиришдан келиб чиққан.

Миқдор жиҳатдан бир-бирига тенг, аммо қарама-қарши ишорали бир-бирига боғланган икки заряд дипол дейилади. Диэлектрик қабулчанликни бинобарин, диэлектрик сингдирувчанликни яккаланган зарядлар эмас, балки диэлектрик диполлар аниқлайди. Диполнинг электр momenti

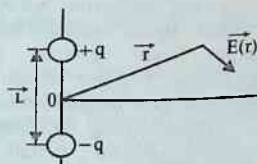
$$\vec{p} = q\vec{l} \quad (12.7)$$

кўринишда аниқланади, бунда q — диполни ташкил этган зарядлар миқдори, \vec{l} — уларнинг оралиги (12.1-расм). Дипол елкаси \vec{l} нинг $\vec{E}(\vec{r})$ майдони аниқланаётган нуқтагача бўлган \vec{r} масофадан анча кичик ($|\vec{l}| \ll |\vec{r}|$)

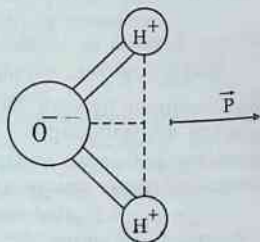
бўлганда мазкур нуқтада

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{3(\vec{p}\vec{r})\vec{r} - \vec{r}^2\vec{p}}{\epsilon r^5}. \quad (12.8)$$

Электр манфийлиги сезиларли фарқланадиган атомлардан таркибланган ҳар қандай симметрик бўлмас молекула доимий электр дипол моментига эга бўлади. Масалан, сувнинг H_2O молекуласи $p = 6,33 \cdot 10^{-30}$ Кл.м дипол моментига эга, у кислород ионидан иккита водород атомини бирлаштирувчи тўғри чизиқ ўртасига томон йўналган. HCl молекуласида бундаги икки атомни тугаштирувчи чизиқ бўйича унинг дипол momenti йўналган. Диэлектрик муҳитда ташқи таъсир (электр майдон, босим ва ҳоказо) остида электр диполлар вужудга келиши (индукцияланилиши) мумкин. У



12.1- чизма. Дипол майдонини ҳисоблашга доир



12.2- чизма H_2O молекуласининг дипол momenti.

ҳолда қутбланиш вектори \vec{P} бирлик ҳажмда ҳосил бўлган диполлар моментлари йиғиндисига тенг бўлади:

$$\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i \quad (12.9)$$

Агар ясси конденсатор қопламалари орасига диэлектрик жойланса ва конденсаторга кучланиш берилса, диэлектрик молекулалари қутбланади (12.3- чизма).

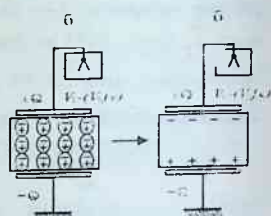
Бунда потенциал ва майдон кучланганлиги камаяди, қопламалар сиртида индукцияланган қолдиқ зарядлар пайдо бўлади. Заряднинг сиртий зичлиги:

$$q_s = -\vec{P}\vec{n}, \quad (12.10)$$

\vec{n} - сиртга нормал бирлик вектор.

Қўпинча атом ёки ионда қутбланишни аниқлайдиган маҳаллий эффе́ктив майдонни ҳисоблаш зарур бўлади. Бунда қаралаётган атом берк сирт билан ўралган деб фараз қилинади. Шу сирт ичидаги диполлар айрим-айрим ҳисобга олинади.

Демак, ташқи зарядлар таъсирида атомда вужудга келган эффе́ктив маҳаллий майдон $E_{эф}$ ни турт қўшилувчидаги иборат шаклда ёзиш мумкин:



12.3- чизма Қопламалари орасида диэлектрик жойлашган конденсатор.

$$\vec{E}_{эф} = \vec{E}_0 + \vec{E}_{нок} + \vec{E}_c + \vec{E}_{дин} \quad (12.11)$$

Бунда \vec{E}_0 — ташқи зарядлар майдони, $\vec{E}_{нок}$ — қутбланишни бузувчи эффе́ктив майдон, \vec{E}_c — фаразий берк сиртда индукцияланган зарядлар мазкур соҳанинг марказида вужудга келтирган майдон, $\vec{E}_{дин}$ — соҳанинг ичидаги барча диполлар ҳосил қилган майдон.

$\vec{E}_0 + \vec{E}_{нок} = \vec{E}_1 V_1/d$ бўлиб, V_1 — конденсатор қопламалари орасидаги кучланиш, d — қопламалар оралиғи.

Демак,

$$\vec{E}_{эф} = \vec{E}_1 + \vec{E}_c + \vec{E}_{дин} \quad (12.12)$$

Агар атом атропоидида тақланган ҳажми сфера десак.

$$\vec{E}_v = \left(\frac{4\pi\vec{P}}{3} \right). \quad (12.13)$$

Бу ҳолда, агар панжара куб шаклида бўлса, $\vec{E}_{\text{дин}}=0$ бўлиб қолади. Бинобарин ($\vec{E}_1 = \vec{E}$).

$$\vec{E}_{\text{эф}} = \vec{E} + \frac{4\pi\vec{P}}{3}. \quad (12.14)$$

(12.2) ифодадан (12.14) га \vec{P} ни қўйсақ, кубик (изотроп) панжаранинг атом жойлашган тугунида эффектив маҳаллий майдон

$$\vec{E}_{\text{эф}} = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E} \quad (12.15)$$

бўлади.

12.2. Диэлектрикларда қутбланиш механизмлари

Диэлектриклар қутбланишининг учта муҳим ҳолини кўриб чиқамиз.

1. Қутбли молекулалар дипол моментларининг маҳаллий электр майдони бўйлаб қисман ёки тўла тизилиши ҳоли. Юқорида айтганимиздек, муайян симметрик бўлмаган молекулалар доимий электр дипол моментга эга. Электр майдон ўз йўналиши томон бу молекулаларни буради. Бу жараённи диполлар ориентрланиши ёки параэлектр қабулчанлик дейилади. Бироқ, молекулаларнинг иссиқлик ҳаракати (тебраниши) уларнинг майдон бўйлаб тизилишига тўсқинлик қилади. Бу икки жараён рақобати оқибатида муайян ориентрланиш ўрнашади.

2. Қаттиқ жисмларда электр майдон ва манфий ионларнинг бир-бирига нисбатан силжиши содир бўлади. Бу ҳодисани ионлар қутбланиши дейилади.

3. Ҳамма диэлектрикларда юз берадиган қутбланиш – электронлар қутбланишидир: электр майдон таъсирида атомнинг электронлари ядрога нисбатан силжийди, яъни электр майдон ҳар бир атомнинг электронлари қобикларини деформациялайди. Бунда ядролар оралиги ўзгариши ҳам мумкин.

Диэлектрик сингдирувчанлик умумий ҳолда: $\epsilon = \epsilon_m + \epsilon_u + \epsilon_s$.

Энди бу ҳолларни айрим-айрим равишда батафсилроқ қараймиз.

12.2.1. Ориентацион қутбланиш

Умуман, доимий диполларнинг бурилиши оқибатида қутбланиш асосан газлар ва суюқликларга хосдир. Қаттиқ жисмларда қутбли молекулалар бўлсада, улар электр майдон таъсирида эркин бурила олмайди. Бундай жараёни молекулаларнинг бир тургун ҳолатдан иккинчисига сакраб ўтиши оқибатида дипол момент билан электр майдон орасидаги бурчакнинг кичрайиш тарзида қараш мумкин.

Бирлик ҳажмида ҳар бири p моментли N та доимий электр диполлари бор бирор муҳитни қарайлик. Электр майдон йўқлигида диполлар тартибсиз йўналган. Энди E статик майдон диполларни тартиблашга уринади. U ҳолда бирлик ҳажмнинг қутбланиши (майдон йўналишига электр моментнинг проекцияси) бундай ёзилади:

$$P_0 = \sum_{\Lambda} p \cos \theta_N = Np \langle \cos \theta \rangle .$$

Бунда θ - ҳар бир дипол ва электр майдон йўналишлари орасидаги бурчак.

Диполлар тартибланиши жараёнига зарралар иссиқлик ҳаракати ҳалақит беради. Иссиқлик ҳаракатини Болцманнинг энергиялар бўйича тақсимот функцияси тавсифлайди деб ҳисобласак, $\cos \theta$ нинг ўртача қиймати

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{\int_0^{\pi} 2\pi \sin \theta \cos \theta \exp(-U/kT) \chi d\theta}{\int_0^{\pi} 2\pi \sin \theta \exp(-U/kT) d\theta} \quad (12.16)$$

ифода билан аниқланади, бунда U диполнинг E майдонидаги энергияси:

$$U = \vec{p}\vec{E} = -pE \cos \theta \quad (12.17)$$

(12.17) ифодани (12.16) даги интегралларга қўйиб, ҳисоблашни бажарсак,

$$\langle \cos \theta \rangle = \left[\frac{1 + \exp(-2pE/kT)}{1 - \exp(-2pE/kT)} \right] = \operatorname{cth} \left(\frac{pE}{kT} \right) = \frac{kT}{pE} = L \left(\frac{pE}{kT} \right). \quad (12.18)$$

Агар ташқи майдон E старлича катта бўлса, $L \rightarrow 1$. Аммо, кучсиз майдонлар ($E \ll kT/p$) ҳолида

$$\langle \cos \theta \rangle \approx \frac{pE}{3kT} \quad (12.19)$$

Демак, бирлик ҳажмнинг қутбланиши

$$P = \left(\frac{Np^2}{3kT} \right) E. \quad (12.20)$$

Бунга мос диэлектрик қабулчанлик

$$\chi = P/E = \frac{Np^2}{3kT} \cdot \frac{P}{E} = \frac{Np^2}{3kT}. \quad (12.21)$$

Қутбли суоқликлар ва қаттиқ жисмлар учун бу қабулчанлик ҳиссаси 1 билан таққосланарли бўлиши мумкин.

Диэлектрик доимийнинг ўзгарувчан ташқи майдон частота-сига (такрорийликка) боғлиқлиги. Доимий диполларга эга бўлган қаттиқ жисмда уччала механизм ҳам қутбланишга (диэлектрик доимийга) ҳисса қўшади. Паст такрорийликларда уларнинг ҳиссалари турлича. Юқори такрорийликларда уларнинг диэлектрик доимийси комплекс $\epsilon = \epsilon' - i\epsilon''$ катталиқ бўлиб, унинг ҳақиқий қисми ташқи майдон билан бир фазада ўзгарувчи диэлектрик қутбланишини ифодалайди, мавҳум қисми эса ташқи майдондан фаза буйича орқада қолаётган механизм пайдо қиладиган диэлектрк йўқотишларни акс эттиради. Мазкур қисмлар Крамерс-Крониг дисперсион муносабатлари билан боғланган:

$$\epsilon' - 1 = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon''(x)}{x - \omega} dx, \quad (12.22)$$

$$\epsilon'' = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon'(x) - 1}{x - \omega} dx. \quad (12.23)$$

Бу ифодалардаги P — интегралнинг бош қиймати белгиси, ω -электромагнит майдон такрорийлиги.

Умуман айтганда, ϵ' ва ϵ'' ўзгарувчан электр майдон такрорийлигига боғлиқ. Диэлектрик доимийнинг модули

$|\epsilon| = \sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2}$ индукция вектори D нинг тебранишлари амплитудасини аниқлайди. Доимий электр майдонда $\epsilon''=0$, $\epsilon'=\epsilon$ бўлади.

Доимий диполлар ориентрланиши билан боғлиқ кутбланиш 10 Гц дан юқори такрорийликданги электр майдон ўзгаришлари кетидан улгура олмайди. Бу ҳолда ϵ' камайиб кетади, аммо ϵ'' нолдан фарқли бўлади, яъни анча диэлектрик йўқотишлар пайдо бўлади. Каттароқ ω ларда бу механизм ҳиссаси йўқ даражада бўлади.

Оптик диапазондаги юқори частотали электр майдонларда диэлектрик хоссаларини синдириш кўрсаткичи n ва ютиш кўрсаткичи k орқали тавсифланади. n , k , ϵ орасида қуйидаги боғланиш бор:

$$n(1 + ik) = \sqrt{\epsilon' - i\epsilon''} \quad (12.24)$$

Ионлар кристалларида $\omega > 10^{13}$ Гц яқинида ϵ' яна ҳам камайди. Бу такрорийликдан юқорида ионлар ҳам майдон ўзгариши кетидан улгура олмайди. Янада юқорироқ $\omega > 10^{15}$ Гц такрорийликларда электронлар кутбланиши ҳисобига ϵ' бирдан катта бўлиб олади. Аммо, $\omega > 10^{15}$ Гц ларда бу механизм ҳам майдондан орқада қолади. Бу ҳолда қаттиқ жисм 1 га яқин диэлектрик ϵ сингдирувчанликка эга бўлади.

12.2.2. Электрон кутбланувчанлик

Синусоидал ташқи майдон таъсирида силжийдиган электрон ҳаракатини қарайлик. Силжиган электронни ўз вазиятига қайтарувчи квази эластик кучни βx , унинг хусусий такрорийлигини $\omega_0 = (\beta/m)^{1/2}$ деб белгиласак, $E_{эфф} = eE_0 \exp(i\omega t)$

маҳаллий электр майдон таъсирида электроннинг ҳаракат тенгламаси

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \beta x = eE_0 \exp(i\omega t) \quad (12.25)$$

кўринишда бўлади.

Бу тенгламанинг мажбурий тебраниш амплитудаси x_{\max} учун ечими

$$x_{\max} = \frac{eE_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (12.26)$$

бу эса $|p| = ex_{\max}$ дипол моментига мос келади. Индукцияланган электрон дипол momenti маҳаллий майдонга пропорционал, яъни $\vec{p} = \alpha_e \vec{E}_{\text{эфф. еки.}} |p| = \alpha_e E_0$.

Пропорционаллик коэффициенти α_e — электрон қутбланувчанлик:

$$\alpha_e = ex_{\max} / E_0 = \frac{e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (12.27)$$

Бу қутбланувчанлик механизмининг диэлектрик синглювчанликка ҳиссаси $\omega < \omega_0$ тақрорийликларда бир хил:

$$\alpha_e = \frac{e^2}{m\omega_0^2}. \quad (12.27')$$

У кўринадиган ёруғлик соҳасида (оптик соҳада) диэлектрик доимий ва синдириш кўрсаткичи $n = \sqrt{\epsilon}$ ни 1 дан катта бўлишининг ягона сабабидир. Бу ҳолда Клаузиус-Мосотти муносабатини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\alpha_e = \frac{3}{N_e} \left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right) = \frac{3}{N_e} \left(\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right), \quad (12.28)$$

бундаги N_e — электронлар зичлиги. (12.27') ва (12.28) ифодалар асосида ҳисоблашдан $\omega_0 \sim 1,7 \cdot 10^{16}$ Гц, бу тақрорийлик электромагнит спектрнинг ултрабинафша соҳасига мос тушади.

Яна бир мулоҳаза юқоридаги ҳисобга тузатма киритади: маълумки, тебранаётган электрон энергия нурлантириши керак; бундан ташқари бу электрон ноэластик тўқнашчиларга (ишқаланишга) дучор бўлиб туради. Бу омилларни ҳисобга олсак, (12.25) тенглама қуйидаги кўринишни олади:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} + \beta x = eE_0 \exp(i\omega t). \quad (12.29)$$

Бу тенгламанинг ечимини:

$$x = \frac{eE_0 \exp(i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega)}. \quad (12.30)$$

Бундан электрон қутбланувчанлик

$$\alpha_e = \frac{e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega)}. \quad (12.31)$$

(12.28) ва (12.31) ифодалардан:

$$\epsilon = \epsilon' - i\epsilon'' = \left[1 + \frac{e^2 N_e}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega) - e^2 N_e / 3} \right] \quad (12.32)$$

Энди $\omega_1 = \left[\omega_0^2 - (e^2 N_e / 3m) \right]^{1/2}$ белгилаш қилиб, ϵ' ва $i\epsilon''$ ни топамиз:

$$\epsilon' = \left[1 + \frac{(e^2 N_e / m)(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \right], \quad (12.33)$$

$$-i\epsilon'' = i \left[\frac{(e^2 N_e / m)\gamma\omega}{(\omega_1^2 - \omega^2) + \gamma^2 \omega^2} \right]. \quad (12.34)$$

12.2.3. Ионлар қутбланувчанлиги

N_e та қутбланувчи электронга ва N_i та қутбланувчи ионлар жуфтига эга бўлган ион боғланишли қаттиқ жисмни қарайлик. Бу ҳолда (12.28) Клаузиус-Мосотти тенгламаси асосида статик диэлектрик сингдирувчанлик ϵ_0 ва қутбланувчанликлар α_i ва α_e орасида боғланишни қуйидагича ёзиб оламиз:

$$3\left(\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2}\right) = N_i \alpha_i + N_e \alpha_e \quad (12.35)$$

Индукцияланган ионлар диполлари ҳиссаси жуда кичик бўладиган, аммо электронлар қутбланувчанлиги сезиларли камаядиган юқори такрорийликда юқоридаги муносабат

$$3\left(\frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2}\right) = N_e \alpha_e \quad (12.36)$$

кўринишни олади. Ионлар қутбланувчанлиги шу икки ифода айирмасидан аниқланади:

$$\alpha_i = (3 / N_i) \left[\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + \infty} - \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 1} \right] \quad (12.37)$$

Ион боғланишли қаттиқ жисмларда α_i катталик 10^{-40}Ф м^2 тартибда. Масалан, NaCl кристалли учун $\alpha_i = 3.8 \cdot 10^{-40} \text{Ф м}^2$.

M+ ва M- массали ионлар жуфти учун электр майдон таъсирида вужудга келган мажбурий тебранишлар тенгламаси

$$\left(\frac{M_+ M_-}{M_{++} M_{--}} \right) \left[\frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x \right] = e E_{эфф} \quad (12.38)$$

кўринишида бўлади, бунда γ — энергия сочишишни тасвирлайди, ω_0 — хусусий такрорийлик. Бу тенгламанинг ечими комплекс катталик бўлади. Қўтбланишнинг иккала тури ҳисобга олинганда Клаузиус — Мосотти муносабати қуйидаги ифодани беради:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \omega_0^2}{(\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega)} \quad (12.39)$$

Бу ифоданинг ҳақиқий ва маъхум қисмларини ажратиш мумкин. Диэлектрик сингдирувчанлик ҳақиқий қисмининг ўзгариши, олдинги ҳолдагидек, сўниши жараёнини акс эттиради. Қаралаётган ҳолда $i\epsilon''$ маъхум қисм ω такрорийликда етарлича юксак максимум қийматга эга бўлади, бу максимум мазкур спектрал соҳада мазкур қаттиқ жисмларнинг яхши маълум бўлган оптик хоссаларини аниқлайди. Масалан, буйлама ва кўндаланг оптик тебранишлар такрорийликлари ω_L ва ω_T статик диэлектрик доимий ($\epsilon_0, \epsilon_\infty$) билан боғлиқ:

$$\omega_L^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \omega_T^2 \quad (12.40)$$

бундаги ω_T^2 нинг ўзи ҳам $\epsilon_0, \epsilon_\infty$ ларга боғлиқ бўлади.

$$\omega_T^2 = \omega_0^2 \left(1 - \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{\epsilon_0 + 2} \right) \quad (12.41)$$

(12.40) ифода анча кенг қўлланиш соҳасига эгадир.

12.1-жадвал

Баъзи ишқорий — галоид ионлар кристалларига тегишли маълумот

Кристалл	ϵ_0	ϵ_∞	$h\omega_T/k, K$
LiF	9,01	1,96	442
NaF	5,05	1,74	354
NaCl	5,90	2,34	245
NaBr	6,28	2,59	195
LiI	16,85	3,80	-

Диэлектрик сингдирувчанлик ϵ яримўтказгичларда киришма сатҳлар назариясида жуда муҳим ўрин тутаганини учун баъзи ковалент (ярим ўтказгич хоссали) кристаллар учун ϵ нинг қийматларини келтирамиз.

Ковалент, ковалент – ион кристалларнинг статик диэлектрик доимийлари

Кристалл	Тузилиши	ϵ_0
Кремний Si	олмос	12,0
Германий Ge		16,0
Қалай Sn		23,8
Кремний карбиди	ZnS га ўхшаш	6,7
Галлий фосфиди		8,4
Галлий арсениди		10,9
Индий арсениди		12,2
ZnS	вюрцит	5,1
Сурмалн индий Insb	ZnS	15,7
ZnSe		5,8
ZnTe		8,3
CdS	вюрцит	5,2
CdSe		7,0
CdTe	ZnS	7,1

Ковалент кристалларда электронлар зарядининг анча қисми атомлар (ионлар) оралигида жойлашган. Бу таъкил этувчи қутбланишга муҳим ҳисса қўшади. Шунинг учун ковалент кристалларнинг диэлектрик хоссалари ҳисобланганида зоналар назариясига (V бобни қаранг) ёки “богланишлар қутбланувчанлиги” деб номланган усулга мурожат қилинади.

12.3. Пирозлектриклар

Қиздирилганда ёки совутилганда сиртида электр зарядлар пайдо бўладиган баъзи кристалларни пирозлектриклар дейилади. Пирозлектрнинг бир томони қиздирилганда манфий зарядланади, иккинчи тамонида аксинча бўлади. Бу ҳодиса шундай тушунтирилади. Пирозлектрлар электр майдон ёки бошқа ташқи таъсир бўлмаганида ҳам \bar{P}_c -ўзининг (спонтан) \bar{P}_c қутбланишига эга бўлади, бунинг сабаби мусбат ва манфий зарядлар марказларининг мос тушмаслигидир. Одатда \bar{P}_c спонтан қутбланиш эмас, балки ўзгариши $\Delta \bar{P}_c$ кузатилади, бу эса температуранинг тез ΔT ўзгаришида юз беради (пирозлектр эффект). Пайдо бўладиган сиртий заряд зичлиги $\sigma = \rho \Delta T$ ифодасидаги ρ ни пирозлектр доимий дейилади. Энг ёрқин

пироэлектр-турмалин, унда температура 1° қалар ўзгарганда $E=40000\text{В/м}$ чамасидаги электр майдон вужудга келади. Агар температура ўзгариши тезлиги заряднинг релаксация вақтидан юқори бўлса, бу ҳолда электрланиш интенсивлиги энг катта бўлади. Барча пироэлектриклар пьезоэлектриклар бўлади, аммо, ҳамма пьезоэлектриклар ҳам пироэлектриклар бўлавермайди. Баъзи пироэлектриклар сегнетоэлектрик хоссаларга молик бўлади. Пироэлектриклардан техникада ёруғлик индикаторлари ва қабуллагичлари сифатида фойдаланилади.

12.4. Пьезоэлектрик ҳодиса

Баъзи диэлектрик кристалларнинг кутбланишини, механик деформация таъсирида ўзгаришини ва аксинча электр майдон таъсирида деформация пайдо бўлишини пьезоэлектрик ҳодиса дейилади, мазкур кристалл моддаларни пьезоэлектриклар деб аталади. Фақат механик деформация таъсирида электр кутбланиш вужудга келишини тўғри пьезоэффект, аксинча бўлишини эса тескари пьезоэффект дейилади. Пьезоэлектрик хоссалар жуда кўп моддаларда кузатилади. Пьезоэлектрик ҳодисани ошкор қилиш учун кристалл пластинкаси ёқларига металл қопламалар ўрнатилади. Агар қопламалар бир-бирига туташмаган бўлса, пластина деформацияланганда улар орасида потенциаллар айирмаси пайдо бўлади. Агар қопламалар туташган бўлса, қопламаларда пластина сиртларидаги зарядларга тенг ва қарама-қарши ишорали зарядлар пайдо бўлади ва занжирда ток оқа бошлайди. Қопламаларга ташқи Э.Ю.К. уланса кристалл деформацияланади.

Пьезоэлектрик ҳодисалар фақат симметрия марказлари бўлмаган кристалларда кузатилади. Аммо, баъзи симметрия элементлари (масалан, симметрия текислиги) бўлишлиги баъзи йўналишларда ёки деформациялашда кутбланиш пайдо бўлишини ман қилади — пьезоэлектриклар сонини чеклайди. Фақат 20 та симметрия нуқтавий гуруҳларига тегишли моддалар пьезоэлектриклар бўла олади. Пьезоэффектни тавсифловчи катталиқ электр катталиқлар билан механик катталиқлар орасидаги пропорционаллик коэффициентидир. Масалан, σ механик кучланиш таъсирида пьезоэлектрикда вужудга келадиган P кутбланиш σ га пропорционал: $P=\alpha\sigma$. Тўла кутбланишга яна

электр майдон ҳиссаси ҳам киради: $P = \alpha\sigma + \chi E$ Умумий ҳолда 18 га турли пьезодоимийлар бўлиши мумкин.

Турли кристаллар учун пьезодоимийлар қийматлари кучли даражада фарқ қилади. Масалан, сегнет тузининг пьезоэлектрик коэффициентлари нисбий қиймати жуда катта, бироқ турмалин ва α -кварцники анча кичик. Аммо, кварцнинг юқори механик ва термик маҳкамлиги туфайли уни юқори даражада барқарор пьезоэлектрик генераторлар тайёрлашда энг маъқул материал сифатида ишлатилади. Бу асбоблар радиоузатгичлар, кварц соатлар такрорийлигини барқарорлаштиради. Бошқа амалий мақсадлар учун юқори даражада пьезоэлектрик эффективлик зарур. Шунинг учун сегнет тузи кўп йиллар давомида сезгир ўзгартиргичлар учун материал бўлиб хизмат қилади. Энг янги нусхаларда барий титанати — стронцийдан ишланган махсус шакли керамик пластиналар қўлланилади, чунки бу материаллар катта пьезоэлектрик эффективликка эга ва яна қиздириш ва намиқишга нисбатан бардошлигидир. Бу материаллардан тозалаш ванналарида ультратовуш манбалари ва сув ости товуш қурилмаларида узатгич ҳамда қабуллагич сифатида фойдаланилади. Биринчи тақрибда электр майдонда диэлектрикнинг деформацияланиши чизиқий боғланишли, механик кучланиш пайдо қилган кутбланиш деформациясига пропорционал. Ионлардан таркибланган ҳар қандай қаттиқ жисмда, унинг пьезоэлектрик бўлиш-бўлмаслигидан қатъий назар, электр майдон кучланганлиги квадратига пропорционал бўлган қисилиш (электрострикция) кузатилади. Бу энг умумий электрострикция ҳодисаси ташқи майдон қўйилганда ионлараро масофанинг ўзгаришини тавсифлаганда Гук қонунининг бузилиши билан боғлиқ. Демак, электрострикция кузатиладиган қаттиқ жисмда ангармоник эффектлар кристалл панжарасининг тебранишлари хоссаларига сезиларли таъсир кўрсатади.

12.5. Сегнетоэлектриклар

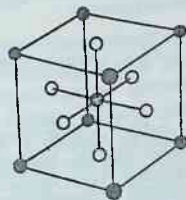
Сегнетоэлектриклар муайян температуралар оралиғида ташқи таъсирлар остида муҳим даражада ўзгарадиган спонтан (ўз-ўзидан) кутбланишли кристаллсимон диэлектриклардир. Сегнетоэлектрик хоссалар биринчи марта (1920) сегнет тузи $\text{NaC}_4\text{H}_4\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ кристалларида кузатилган ҳозир бир неча юз сегнетоэлектрик моддалар маълум. Сегнетоэлектрик хоссалар

пайдо бўлиши учун кристалл тузилишида инерция маркази бўлмаслиги ва ҳеч бўлмаганда битта ноэквивалент йўналиш бўлишлиги зарур. Пьезоэлектрик хоссалари мавжуд бўлган кристалларнинг 20 та нуқтавий гуруҳларидан 10 таси иккинчи шартни қаноатлантиради. Демак, сегнетоэлектрик модда пьезоэлектрик бўлиши керак, аммо ҳар қандай пьезоэлектрик ҳам сегнетоэлектрик бўла олмайди. Сегнетоэлектрикларни баъзан ферроэлектрлар дейилади. Бунинг сабаби шуки, ферромагнитлардаги доменлар каби сегнетоэлектрикларда ҳам доменларнинг — катта спонтан (ўз-ўзидан) қутбланган соҳаларнинг (ташқи электр майдон бўлмаганида ҳам электр диполлар тартибланган катта электр моментлари бўлган соҳаларнинг) бўлишлигидир. Сегнетоэлектриклар учун махсус Кюри нуқталари деб аталадиган T_c температуралар мавжуд. Бу нуқтадан юқори температурада сегнетоэлектрик ҳолат (доменлар) бузилади, чунки бу ҳолда иссиқлик тебранишлари амплитудаси электр диполлар тартибли жойлашишига йўл бермаслик даражасида каттариб қолади. Паст температурада сегнетоэлектрик бўлган қаттиқ жисм Кюри нуқтаси T_c дан юқори температурада $\chi=C/(T-T_c)$ қабулчанликка эга бўлган параэлектрик бўлиб қолади.

12.3-жадвал

Модда	Кимёвий ифодаси	T_c, K	$P_s, Кл/м^2$
Барий титанати	$BaTiO_3$	393	$2,6 \cdot 10^{-1} (300K)$
Стронций титанати	$SrTiO_3$	32	$3,0 \cdot 10^{-2} (4,2K)$
Калий ниобати	$KNbO_3$	710	$3,0 \cdot 10^{-1} (600K)$
Аммоний сульфати	$(NH_4)_2SO_4$	223	$4,5 \cdot 10^{-3} (220K)$
Сегнет тузи	$NaKC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$	296(юқориси) 255(пасткиси)	$2,5 \cdot 10^{-3} (275K)$

12.3-жадвалнинг охириги устунидаги P_s катталиқ Кл/м² бирликларда спонтан (ўз-ўзидан) ҳажмий қутбланишни ифодалайди. $BaTiO_3$ нинг спонтан (ўз-ўзидан) қутбланиши келиб чиқишини қарайлик. Бу бирикма перовскит тузилишига эга (12.4-чизма). $BaTiO_3$ нинг панжараси $T_c = 393K$ дан юқорида кубсимон шаклда бўлади, сегнетоэлектрик ҳолатга ўтишда кубдан тетрагонал четланишлар пайдо бўлади. T_c дан паст



12.4- чизма. Барий титанати $BaTiO_3$ нинг тузилиши.

температурада элементар ячейкада ўзгаришлар юз беради: у бир ўқ (с ўқ) йўналиши бўйлаб 1% қадар чўзилади, бу йўналишга тик ўқлар бўйлаб тахминан 0.5% қадар қисилади. Барий ва титаннинг барча катионлари панжарачаси кислород анионлари панжарачасига нисбатан с ўқ бўйлаб юқорига ёки пастга силжийди, бу эса кристалл энергиясини пасайтиради. Шу икки панжарачаларнинг ўзаро силжиши тахминан 0.1

га тенг бўлиб, катта ҳажмий қутбланиш вужудга келишлиги учун етарлидир.

Тетрагонал сегнетоэлектрик $BaTiO_3$ кристаллда P_s панжарачалар нисбий силжиши йўналишига боғлиқ равишда, ё «юқорига» ёки «пастга» силжийди. Титан (ёки барий) ҳар бир иони кристалл панжарасида энергияси энг кичик бўладиган икки вазиятга эга, уларни энергетик тўсиқ бир-биридан ажратиб туради. T_c дан юқори температураларда бу тўсиқ йўқ бўлади. Турли сегнетоэлектрик моддалар гуруҳлари учун уларнинг табиати турлича тушунтирилади, ammo барча тушунтиришлар кристалл энергиясининг ионлар вазиятига боғлианиши икки минимумли эгри чизик кўринишида бўлади, дейди.

Юқорида айтилганидек, T_c дан юқори температураларда сегнетоэлектрикнинг спонтан қутбланганлиги йўқ бўлади, ammo қаттиқ жисм жуда катта диэлектрик доимийга эга бўлади. Масалан, $BaTiO_3$ дан тайёрланган керамикада ϵ то 6000 гача етади. T_c температурадан пастда сегнетоэлектриклар статик қутбланиши бошқа илмий мақсадларда ишлатилади. Қутбланган сегнетоэлектрикли конденсатор микрофони талабгорлари кўп. $BaTiO_3$ ва бошқалар лазер нурини оптик (кувур) ичак ичида ҳам, ташқарисида ҳам модулланиш ва оғдириш учун қўлланилади.

12.6. Сегнетоэлектрик доменлар ва антисегнетоэлектрик ҳодисалар

Катта сегнетоэлектрик монокристалл турли йўналишда қутбланишли доменлар (дипол моментлар бир хил йўналган соҳалар) тўпламидан иборат бўлганлиги сабабли бугун ўзи спонтан қутбланган бўлишлиги мажбурий эмас. Мазкур домен қарама-қарши қутбланишли доменлар билан ўралган ҳол кўп учрайди. Бу ҳолда 180-градусли домен деворлари ҳақида гапи-

рилади. Ташқи E электр майдон қўйилганда домен деворлари кўчиш имконига эга бўлади. Бунда P_s қутбланиш йўналиши E майдон билан мос тушган ёки деярли мос тушган доменлар ўсади, P_s қутбланиши қарама-қарши йўналган доменлар қисқара боради. Сегнетоэлектрикларнинг доменлардан тузилиши муайян даражада ферромагнетикларникига ўхшашиб кетади, ammo улар орасида муҳим фарқ бор: магнит доменлар орасидаги деворлар қалинлиги 750 \AA (ва энергия нисбатан кичик), сегнетоэлектрик доменлар орасидаги деворлар қалинлиги бир ёки икки атомларо масофага тенг ва энергияси катта зичликка эга.

Кўпчилик сегнетоэлектрик материалларда микроскопик доменлар тузилиши анча мураккаб бўлади.

Шундай қилиб, сегнетоэлектрик материалларда T_c Кюри нуқтасидан паст температураларда индукцияланган диполларнинг тартибли жойлашиши вужудга келади, бу эса кристалл энергиясини камайтиради. Антисегнетоэлектрик қаттиқ жисмларда ҳам T_c дан пастда индукцияланган диполлар тартибланади, бу моддалар синфи ҳажмий спонтан қутбланишга эга эмас, чунки ҳар бир дипол қўшни диполларга антипараллел йўналган. Умуман айтганда, қўшни занжирчалар (қатламлар) диполлари антипараллел тизилиб, бирор температурадан пастда занжирчалар диполларининг параллел йўналганлиги ҳолидагига нисбатан пастроқ тўла энергия бўлишчилигини таъминлайди. Натрий ниобати NaNbO_3 ва кўргошин цирконати PbZrO_3 бирикмалар муайян температурадан пастда антисегнетоэлектриклардир.

12.7. Диэлектрик йўқотишлар

\vec{E} ўзгарувчан электр майдон энергиясининг бир қисми диэлектрикни қайта қутблашда иссиқликка айланади, чунки зарраларнинг моддада барча ҳаракатлари уларга электр майдон берган энергиянинг қисман исрофи билан боғлиқ бўлади. Шу исрофни диэлектрик йўқотишлар дейилади. Зарралар ҳаракати қанча катта бўлса, диэлектрик йўқотишлар шунча катта бўлади. Демак, улар \vec{E} майдоннинг ω такрорийлигига боғлиқ. Агар диэлектрик қутбланишда асосий ўринда электронлар ва ионларнинг кичик силжишлари бўлса, бу ҳолда диэлектрикни гармоник тебрангичлар (осцилляторлар) тўпламидан иборат

деб қаралиши ва бу тебрангичлар ўзгарувчи E майдонда мажбурий тебранишлар қилади дейилса, агар ω тебрангичнинг ω_0 хусусий такрорийлигига яқин бўлганда энергия йўқотиш энг катта бўлади (резонанс). Асосий кутбланиш электронлар силжиши билан боғлиқ бўлса, бу ҳолда йўқотишлар оптик такрорийликда ($\approx 10^{15}$ Гц) максимумга эришади, аммо электротехник ва радиотехник такрорийликда назарга олмаслик даражасида кичик бўлади. Ионлар силжиши билан аниқланадиган кутбланишда диэлектрик йўқотишлар ИК нурлар соҳасида (10^{12} - 10^{13} Гц) энг катта бўлади. Ориентацион кутбланишда диэлектрик йўқотишлар яна ҳам кичик такрорийликларда сезиларли бўлади. Юқори такрорийликларда дипол моментлар ўз йўналишини майдонга мослаб улгурмайди, йўқотишлар кичик. Паст такрорийликларда кутбланиш майдон кетидан улгуриб боради, силжишлар катта, аммо уларнинг вақти ҳам катта бўлганидан диэлектрик йўқотишлар кичик. Ташқи ўзгарувчи $E(\omega)$ майдоннинг такрорийлиги молекулалар ориентланиши ўрнашиши вақтига (релаксация вақтига) тенг бўлса, диэлектрик йўқотишлар энг катта бўлади. Масалан, сувда кутбланиш асосан ориентацион механизмга эга, $\omega_{\text{max}} \approx 10^{11}$ Гц чамасида.

Диэлектрик йўқотишлар миқдоран диэлектрик йўқотишлар бурчаги tg билан аниқланади. Бурчак кутбланиш вектори P ва электр майдон кучланганлиги E орасидаги фаза фарқини ифодалайди.

Ҳақиқий диэлектриклар қандайдир σ электр ўтказувчанликка эга, диэлектрик йўқотишларнинг бир қисми ана шу σ га боғлиқ. Паст такрорийликларда ўтказувчанлик билан боғлиқ жоул иссиқлиги ажралиши муҳим бўлиши мумкин, чунки $\omega \rightarrow 0$ да ҳам у нолга тенг эмас, агар диэлектрик йўқотишлар фақат ўтказувчанликка боғлиқ бўлса, у ҳолда $\text{tg}\delta = 4\pi\sigma/\omega$ бўлади.

12.3. Диэлектриклар тешилиши (бузилиши)

Диэлектриклардан ўтаётган ток зичлиги (унча кучли бўлмаган электр майдонлар ҳолида) Ом қонуни $j = \sigma E$ асосида майдон кучланганлигига пропорционал бўлади. Аммо, етарлича кучли электр майдонларда Ом қонунидан четланиш, яъни токнинг E га боғлиқ равишда жуда тез ўсиши юз беради. Му-

айян $E=E_0$ майдонда диэлектрикнинг электр тешилиши содир бўлади, яъни бунда диэлектрик ўтказувчанлиги кўп даражада ортиб кетади, чунки унда юқори ўтказувчанликли канал (каналлар) пайдо бўлади. E_0 ни диэлектрикнинг электр маҳкамлиги дейилади. Кварц шиша мисолида $\rho=10^{16}-10^{18}$ Ом см, $E_0 = (2-3) \cdot 10^5$ В/см.

Қаттиқ диэлектрикларда электр тешилишдан ташқари яна иссиқликдан тешилиш ҳам мавжуд. Бу ҳолда ток ортиши билан температура (жоул иссиқлиги ортади, бу эса ҳаракатчан заряд ташувчилар сони ортишига ва солиштирма қаршилиқ камайишига олиб келади. Электр тешилишдан майдон кучайиши билан унинг таъсирида заряд ташувчилар ҳосил бўлиши тез кўпаяди. Диэлектрикда тешилиш муқаррар нобиржинсликлар ёрдамлашади, чунки у жойларда E бошқа жойлардан катта бўлади.

Диэлектрик тешилганда ҳосил бўлган ўтказувчан ингичка каналларни шнурлар (найчалар) дейилади, ток шу каналлардан катта зичликда оқади, канал ҳатто эриб кетиши мумкин.

Диэлектрикнинг тешилиши қайтар ва қайтмас бўлиши мумкин: тешилиш жараёнида диэлектрик тузилиши ўзгармаса, бу тешилиш қайтар бўлади ва аксинча.

Диэлектриклар **қўлланиши**. Кўпчилик диэлектриклар кейинги давргача асосан электроизоляцияцион материаллар сифатида ишлатиб келинади. Аммо, диэлектриклар қўлланидиган соҳалар кенгайиб борди, улар хилма-хил вазифаларни ўтайдиган бўлди. Диэлектрикларнинг конденсаторларда ишлатилиши маълум, электр токи ўтказгичларини электр энергиянинг беҳуда исроф бўлишига йўл қўймайдиган диэлектрик (изоляцияцион) қатламлар билан ўралишини ҳам биламиз. Пьезо-электриклар товуш тебранишларини электр тебранишларга ва аксинча айлантириш вазифасини бажаради, пирозлектриклар ИҚ нурланишни ошкорлаш ва интенцивлигини (энергияси зичлигини) ўлчашда қўлланилади, сегнетоэлектриклар радиотехникада ночизиғий элементлар сифатида ишлатилади. Диэлектрикларга киришмалар киритиб, уларни рангли қилиш, яъни оптик филтърлар тайёрлаш мумкин. Кўпгина диэлектрик кристаллар (AlGaAs , CdS , рубин ва б.) квант электроникасида лазерлар ва кучайтиргичлар асоси бўлиб хизмат қилади.

Диэлектриклар яримўтказгичлар электроникасида муҳим ўрин эгаллайди. Улар интеграл микросхемалар элементлари

сифатида, ярим ўтказгич асбобларнинг сақлагич сиртий қопламлари кўринишида ишлатилади, металл-диэлектрик — ярим ўтказгич транзисторлар таркибига киради.

Масалалар

1. $+q$ ва $-q$ зарядлардан ташкил топган электр диполнинг дипол марказидан $\vec{r} \gg \vec{l}$ (\vec{l} — дипол елкаси) нуқтадаги майдоннинг кучланганлиги $\vec{E}(\vec{r}) = \frac{3(\vec{p}\vec{r})\vec{r} - r^2\vec{p}}{4\pi\epsilon_0 r^5}$ ифодага мос келишини аниқланг.

2. Бирлик ҳажмининг дипол моменти \vec{P} бўлган бир жинсли диэлектрик ичида сферик ковак бор. \vec{P} вектор z ўқ бўйича йўналган деб ҳисоблаб, z ўқ билан ковак сиртидаги бирор нуқтага ковак марказидан ўтказилган радиус-вектор r орасидаги бурчакни θ деб белгилаб, ковак марказидаги майдон $\vec{E} = 4\pi\vec{P}/3$ бўлишлигини исботланг.

3. Қутбли қаттиқ жисм учун Дебай температураси 153 К. $T = 270$ К да 110 кГц такрорийликда диэлектрик йўқотишлар эгри чизигида максимум кузатилган. Бунинг ўртасида 0.4 эВ тўсиғи билан диполларнинг икки имконий ориентрланиши мавжудлигига мос тушишлигини исботланг. Бу ҳолда қуйидаги Дебай ифодаси ўринли: $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon'' = A + \frac{B}{1 - i\omega\tau}$, бундаги $\tau = (2\pi\nu_D)^{-1} \exp(U/kT)$ икки имконий ориентирланиш орасида ўтиш (релаксация) вақти, $\nu_D \approx \frac{k\theta_D}{h}$, θ_D — Дебай температураси, $A=5$ ва $B=15$ деб юқоридаги ифода асосида $\epsilon'(\omega)$ ва $\epsilon''(\omega)$ боғланишлар графигини чизинг. 250 дан 290 К гача ораликда $\epsilon''=0,5\epsilon''_{\max}$ бўлиб чиқиши керак.

XIII БОБ

КЕРАМИК ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР. КОМПОЗИТЛАР

13.1. Керамик материаллар ҳақида умумий маълумот

Ҳозирги замонда керамик материаллар соҳаси жуда кўп моддаларни — қурилишда ишлатиладиган гиштдан то энг янги юқори температурада ўта ўтказувчан керамик қотишмаларгача бўлган қаттиқ жисмларни ўз ичига олади. Улар хилма-хил хос-саларга эга ва фан, техникада кенг қўлланилмоқда. Шунинг учун ушбу қўлланмада керамика тўғрисида тўлароқ маълумот келтиришнинг иложи йўқ ва биз бу ҳақда асосий хоссаларнинг қисқа баёнини келтираемиз.

Керамик материалларнинг атомлари орасида ионларга хос ва ковалент боғланишлар учрайди. Бу боғланишлар ҳақида I бобнинг I.5.1- ва I.5.2-бандларида маълумот берилган. Бу ерда шуни таъкидлаш керакки, ионлар боғланиши ҳолида электронлар зарядлари ионлар атрофида йиғналган, ионлар орасида, табиий, электростатик кучлар таъсир қилади. Ковалент боғланиш ҳолида электронлар заряди (зичлиги) қўшни атомлар орасида унча мунча текис тақсимланган, бунда электростатик ўзаро таъсир кучсиз, аммо квант ўзаро таъсири асосий бўлади.

Технологик жараённинг қандай боришига қараб бир модда турли тузилма ҳосил қилади. Масалан, SiO_2 моддасини суюлтириб сўнг секин совута борилса, кристобалит кристалли ҳосил бўлади, агар SiO_2 нинг суюлмаси тез совутилса — силикат шиша (аморф жисм) олинади. Бу иккови қаттиқ жисм керамикага мансубдир.

Ҳозир керамика дейилганда металл табиатли бўлмаган ҳамда полимер (занхирсимон) тузилишга эга бўлмаган қаттиқ модда тушунилади. Шишалар, монокристаллар, конгломератлар, майда кристаллар ва уларнинг бирлашмалари керамик материаллардир.

Алюминий оксиди Al_2O_3 асосида керамик материалларга турли хоссалар бериш мумкинлигини кўрайлик.

Al_2O_3 ning айрим доналари (корунд) материалларни силлиқлаш ва сайқаллашда ишлатилади. Донадор тузилишли Al_2O_3 поликристаллари кўринадиган ёруғлик соҳасида яхши шаффоф (тиник) бўлганлиги туфайли улардан юқори температура ва юқори босимда ишлай оладиган оптик деразалар тайёрланади. Al_2O_3 намунасида титан кришмаси бўлса, уларни сапфир дейилади ва у спектрнинг ИК соҳасида шаффоф, оптоэлектроникада қўлланилади.

Al_2O_3 кристалига хром қўшилса, уларни *рубин* дейилади. Рубин оптик квант генераторларда ишчи жисм сифатида ишлатилади.

13.2. Қурилмалар ва асбобларда қўлланиладиган керамика

Керамиканинг кимёвий ва термик чидамлиги улардан қурилмаларда фойдаланиш имконини беради. Бу хоссалар атомлараро боғланишларнинг кучли бўлишиги ва қўтчилик металллар оксидларидан таркибланган керамик моддаларнинг (КМ) яна оксидланиши амалда мумкин эмаслигидан келиб чиқади.

Кимёвий боғланишларнинг мустаҳкамлиги КМларнинг юқори суюлиш температурасига ва қаттиқликка эга бўлишигини тақозо этади, атомлар қатламларнинг ўзаро сирпанишига йўл бермайди, КМ ташқи кучланиш берилганда ўз шаклини сақлайди, лекин агар юклама бирор бўсағавий қийматга эришганда бирданига барбод бўлади, уларда металллардагидек пластик деформация бўлмайди.

КМларнинг мазкур хоссаларини тушуниш учун уларда мавжуд бўладиган нуқсонларни — киришмалар, якка вакансиялар ва уларнинг уюмлари (ваканцион коваклар), микродарзларни кўриб чиқиш зарур.

Кристалл керамика ва шишанинг мўртлигини миқдоран қайишқоқлик аниқлайди, у тахминан $MПа/м^{1/2}$. Металлар учун $у 40 MПа/м^{1/2}$ чамасида.

КМ даги киришмалар ва микроковаклар ҳам қўйилган ташқи юкламани ўзига жалб қилади. Улар атомлараро боғланишларни сусайтиради, осон узиладиган қилади, шунинг учун нуқтавий нуқсонлар атрофида боғланишларнинг пластик деформацияси бўлиши қийин. Оқибатда нуқсонлар жойида коваклар катталаша боради.

Демак, нуқсонларнинг таъсирини ўрганиш КМларининг фойдали хоссаларини яхшилашга қаратилган. Коваклар, агломератлар, кимёвий киришмалар каби нуқсонларни бартараф қилиш зарур, чунки улар дарзларнинг пайдо бўлиши манбеларидир. Бунинг учун дастлабки кукунни (порошокни) синчиклаб тозаланади ва жуда майдалаб, зичлаб тахланади.

Технологик жараён куйидаги босқичлардан иборат: металл оксиднинг, масалан, TiO_2 нинг кичкина диаметри ($< 1\mu m$) заррачалари эритмадан ўтказилади. Бу зарралардан (масалан, метанолда) махсус суспензия тайёрланади, унга қўшилган полимер заррачалар сиртига ёпишиб, уларнинг агломератлар шаклида уюшиб кетишига йўл қўймайди. Олинган порошок (кукун) «назорат қилинадиган тахлашга» дувор қилиниб, ивиштирилади. Натижада амалда коваксиз материал олинади. «Назоратли тахлаш» энг муҳим жараён қисмидир. Бунда катта босим остида қолипларда қисил билан бир қаторда қиздириладиган пресс-қолипда зичлаш, замбаракнинг ёпиш-стволида портлаш ёрдамидаги зичлаш, шунинг зичлаш, электр майдонда полимер қобикли порошок (кукун) мадралани ҳаракати — электрофорез ёрдамида зичлаш усулидан қўлланилади. Майда кукун (порошок) олинган лавеллар технологияси муваффақиятли қўллана бошланди. Бу $AlCl_3$ ва $B(CN)_3$ туридаги органометалл молекулалар ёки $SiCl_4$ турли молекулаларни лазер нурлари таъсирида парчаланиш асосланган. Бу ҳолда металл зарралари металл ёрдамида газга тўлдирилган камера деворларида майда қисиллар (порошок) кўринишида ўтиради. Балки камерага металл таглик жойланади.

Кукун (порошок)ни уйдирини оқсидни қисил билан зичланган зарралар тутиниши мустақамлигини оширишнинг Одатда зарралар чегарасида қисилнинг ёпиш қисил коваклар кўп бўлади. Масалан, SiC ёки SiN қисилларнинг сийрак ер металлари оксидлари қисилдан, ёки SiO_2 билан SiO_2 реакциялар $K_2CO_3 + SiO_2 \rightarrow K_2SiO_3 + CO_2 \uparrow$ ёки $CaCO_3 + SiO_2 \rightarrow CaSiO_3 + CO_2 \uparrow$ реакциялар оқибатида вақансиз қисилларнинг K_2SiO_3 , $CaSiO_3$ сувоқ сикликатларнинг ёпиш қисил мустақамлигини оширишнинг яна бир йўли қисилнинг остида дарзлар ўсишини тўхтатишдир.

Босим остида кристалл тузилишини ўзгартириш усули ҳам КМ мустаҳкамлигини оширишга хизмат қилади. Масалан, босим остида тетрагонал тузилишли диоксид ZrO_2 моноклин тузилишли бўлиб қолади. Моноклин тузилишли ZrO_2 нинг ҳажми тетрагонал тузилишлисидан 3...5% қадар катта. Кенгайиб бориб, доналари дарзни қисади, дарз энди кенгая олмайди.

Яна бир усул шундан иборатки, мазкур керамикага ундан мустаҳкамроқ керамика толалари киритилади. Бундай КМда дарз ўсишда толага дуч келади ва нарига ёйилмайди. Амалда SiC кремний карбиди толаларидан фойдаланилади.

Дарзларни тўхтатишнинг учинчи усули дарзнинг учини тумтоқлашдир.

Мазкур КМга бошқа моддаларнинг оз қўшимчасини киритганда ҳосил бўладиган бир жинс (гомоген) соҳалар пайдо бўлади, албатта. Шу соҳаларни имкони борича торайтириш КМ ларни мустаҳкамроқ қилади. Ҳозир шу асосда $0 \leq X \leq 5$ оралиқда $Si_{6-x}Al_xN_{8-x}O_x$ каби юқори мустаҳкамликка эга бўлган КМ лар — сиалонлар яратилган.

КМ лар иккита муҳим соҳада — металлга ишлов берадиган кесувчи асбобни ва ҳаракатлангиргичлар қисмларини тайёрлашда қўлланилмоқда.

Керамик асбоб, мустаҳкамланган керамикадан ясалган кескичлар узоқ муддат ишлаши шароитида, кесиш тезлигини кўп марта ошириш имконини беради, анча энергия тежашга олиб келади.

Ҳаракатлангиргичларнинг қисмлари — турбиналарнинг ҳаракатланувчи ва қўзғалмас кураклари юқори даражада мустаҳкам бўлган ва унча мўрт бўлмаган керамикадан тайёрланса, улар металл ва қотишмаларга нисбатан, анча юқори температураларда ҳам ишлай олади, Ф.И.Кси анча юқори бўлади, зичлиги кам, чидамлиги юқори.

КМлар автомобил ҳаракатлангиргичлари қисмларини тайёрлашда ҳам қўлланилади, механик зичлангиргичлардан сув қувурларни беркитувчи жўмрақларда фойдаланилади.

13.3. Радиоактив материаллар ва чиқиндиларни сақлайдиган контейнерлар учун керамика

Ушбу мақсадга эришишнинг учта босқичи бор:

- 1) Чиқиндилар нисбатан эриб кетмайдиган кимёвий жиҳатдан чидамли модлага киритилади,
- 2) Бу модда герметик контейнерга жойланади,
- 3) Контейнерларни қуруқ ва барқарор геологик заминда қўмилади.

Биринчи босқичда борсиликат шиша ва бор (В) ли керамика қўлланади, чунки бу моддалар нейтронлар ва γ -квантларни кучли даражада юта олади. Бу модда ичила қўрғошин ҳам бўлади. PbO ва $2PbO$, $PbSO_4$ оксидлар γ -нурларни энг яхши ютади. Уларни зичлаш олдидан B_2O_3 , B_4C , MBC_4 , MB , MB_2 моддалар кукунига аралаштирилади.

Иккинчи босқичда бетонлар ва бор (В) — қўрғошинли ерамика қўлланилади. А. Рингвуд (1978й. Австралия) «синрок» деган махсус керамикани яратди, у жуда барқарор бўлиб, перовскит ва цирконлит табиий минераллари асосида яратилган. Шундай қилиб, керамик материаллар радиоактив материаллар ва чиқиндиларни сақлашда қўлланилади.

13.4. Керамик ферритлар

Маълумки, модданинг магнит хоссалари кристалл панжарасини ҳосил қилган атомлар магнит моментларининг ўзаро таъсири қандай бўлишлигига боғлиқ.

Ферритлар темир ва бошқа элементлардан таркибланган мураккаб оксидлардир. Уларнинг кўпчилиги ферримангнитлар бўлади ва ўзида ферромагнит ва ярим ўтказгич ёки диэлектрик хоссаларни мужассамлаштирган, радиотехникада радиоэлектроникада, ҳисоблаш техникасида магнит материаллар сифатида қўлланилади.

Ферритларнинг кристалл панжараси иккита таркибий панжарадан иборат бўлиб, улардаги атомларнинг магнит моментлари қарама-қарши йўналган, аммо улар бир-бирига тенг эмас. Бошқача айтганда, бундай моддаларнинг кристалли панжарасида табиати турли атомлар қўшни бўлади. Табиий ферримангнитнинг энг ёрқин мисоли магнетит $FeO \cdot Fe_2O_3$ бўлади. Унинг кристаллида кислороднинг манфий ионлари

кубик панжара ташкил қилади, унда ҳар бир $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ молекулага бир Fe^{++} йон ва иккита Fe^{+++} ион тўғри келади. Бу ионлар ўрнини икки валентли бошқа металллар (Mg , Ni , Co , Mn , Cu ...) ионлари M^{++} эгаллаши мумкин. Бундай ферритларда бир таркибий панжара Fe^{+++} ионларнинг ярмидан тузилган, иккинчиси эса Fe^{+++} ионларнинг иккинчи ярми ва M^{++} ионлардан ташкил топган.

M металнинг $\text{M}^{++}\text{O} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ мураккаб оксиддаги қотишмаси (қаттиқ эритмаси), масалан, $\text{Li}_x\text{Mn}_{1-x}\text{O} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$, $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Fe}_2\text{O}_3$ ва бошқалар катта аҳамиятлидир. Ферритларнинг ферромагнит материаллардан иккита муҳим фарқи бор: 1) уларда юқори магнит хоссалар (кичик коэрцитив куч, магнит қабулчанликнинг катта бўлишлиги ва ҳ.к.) билан биргаликда юқори даражада изоляцион хоссалар ҳам мавжуд;

2) ферритларнинг солиштирама электр қаршилиги $10^3 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ га ётади, бу эса темирникидан миллион марта тартибда катта, гистерезис сиртмоғи тўғри тўртбурчак шаклида.

Ана шу фазилатлар ферритларнинг кенг амалий қўлланишига сабаб бўлган. Улар индуктивлик ғалтақлари трансформаторлар, дросселлар, магнит антенналар ва бошқа магнит ўтказгичлар ўзаклари сифатида юқори такрорийликларда ишлашни таъминлайди. Ферритлар тўлқин қувирларида ўта юқори такрорийликли электромагнит тўлқинларни бошқарадиган асбобларда қўлланади.

Ҳисоблаш техникасида қўлланадиган ферритлар тўғри тўртбурчакли гистерезис сиртмоғига ва нисбатан кичик коэрцитив кучга эга бўлади.

$\text{BaO} \cdot (\text{Fe}_2\text{O}_3)_6$ туридаги ферритлар катта коэрцитив кучга эга (80 $\text{KA}/\text{м}$ дан ортиқ) ва улардан доимий магнит тайёрланади.

Ферритнинг таркибий панжараларида Fe^{++} ионлар, катионлар тақсимоти ва уларда нуқсонлар миқдори газнинг таркибига, куйдириш температурасидан совиштиш тезлигига боғлиқ. Бу боғланишлардан ферритларнинг магнит ва электр хоссаларини шакллантиришда фойдаланилади.

13.5. Сегнетоэлектрик ва пироэлектрик керамик материаллар

XII бобда сегнетоэлектрик ва пироэлектриклар тўғрисида маълумот берилган эди. Бу ерда сегнетоэлектрикларнинг диэлектрик қабулчанлиги χ электр майдоннинг ночизигий

функцияси бўлишлигини эслатиб ўтамиз, бунинг сабаби уларда спонтан (Ўз-Ўзидан) қутбланишнинг мавжуд бўлишличигидир, у, муайян температура оралиғида, электр майдон бартараф қилинганлигидан кейин ҳам сақланади. Бу биринчи марта сегнет тузи $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ да -18 ва $+24^\circ \text{C}$ оралиғида спонтан қутбланиш кузатилган.

Пастки температурадан қуйида сегнетоэлектрикдаги зарядлар ҳаракатсиз, юқори температуралардан баландда эса кучли иссиқлик ҳаракати оқибатида зарядлар қутбланиши йўқолади. Сегнетоэлектрик ҳолат мавжуд соҳада бу моддалар пирозэлектрик хоссага ҳам эга: иситилганда қутбланиш ўзгаради ва э.ю.к. вужудга келади.

Барий титанати BaTiO_3 (Б.М.Вул, 1945й) кашф қилингандан кейин сегнетоэлектрикларнинг техникада (аввало, конденсаторларнинг диэлектрик қатлами сифатида) хенг қўлланиши бошланди. Сегнетоэлектрик яхши изолятор, у қутбланиш эвазига электр заряд жамғаради.

Агар сегнетоэлектрик керамика кристалларида кристалл марказига нисбатан зарядлар симметрикмас тақсимланган бўлса, у ҳолда механик деформация оқибатида қутбланиш силжийди, бу ҳодисадан пьезоэлектрик керамикада фойдаланилади. Баъзи пьезоэлектрик материаллар намуналари учлари орасида 10^4 В дан катта кучланиш ҳосил бўлиши мумкин. Қисқа туташишда чиқадиغان учқундан ўт олдирувчи қурилмаларда (масалан, ҳаракатлантиригичларда) фойдаланилади. Пьезокерамикада механик энергияни электр энергияга айлантиришда исроф кам бўлганлиги учун, ультраовушдан фойдаланиладиган медицина асбобларида ва бошқаларда самарали қўлланади.

Сегнетоэлектрик керамика фавқулодда нозик, субмикрометрли диапазонда кўча оладиган ҳаракатлантиригичлар яратиш имконини берди, бу асосда туннел микроскоп кашф қилинди.

Сегнетоэлектриклар асосида ёруғлик модуляторлари тайёрланган.

Ҳозир кўп миқдорда сегнетоэлектрик моддалар маълум. Уларнинг табиати тўла аниқланмаган бўлсада, аммо бир қатор муҳим қонуниятлари топилган. Масалан, сегнетоэлектрик ҳолат бўлиши учун қандайдир ички деформация ёки тартибсизлик даражаси бўлмоғи зарур. Масалан, BaTiO_3 да титан ва барийнинг панжаралари кислород панжарасига

нисбатан силжиган бўлади. Керамикани тайерлашда электр кучланиш берилганда кристалл доналари тартибсизлик тартиблиликка ўтадиган бўлиб қайта йўналади. Барий титанатида панжаралар силжиши билан боғлиқ ички деформация намоён бўлади. Бошқа ички деформациялар ҳам бўлади.

Пирозэлектрик керамика I^{\pm} нурланиш детектори (ошкорлагичи) сифатида қўлланилади, бундай детекторларнинг сезгирлиги жуда юқори, уларнинг ёрдамида температуранинг 10^{-6} К қадар ўзгаришини ўлчаш мумкин.

13.6. Ўта ўтказувчан керамика

Голландия физиги Х. Камерлинг-Оннес биринчи марта газларни суюлтириб паст температуралар ҳосил қила бошлаган олим — 1911 йилда симобнинг электр қаршилигининг температура пасайганида сакрашсимон йўқолишини биринчи марта кузатиб, симоб $T=4.15\text{K}$ да ўта ўтказувчанлик деб аталган янги ҳолатга ўтади деган хулосага келди. Бундан бир неча йиллар олдин кўпгина металл элементлар, қотишмалар, интерметалл бирикмалари, баъзи ярим ўтказгичлар, полимерлар паст температураларда ўта ўтказгич бўлиб қолишлиги аниқланган эди. Nb_3Ge германий ниобат энг юқори ўтиш температурасига (23 К атрофида) эга деб ҳисобланар, 1986 йилда Г. Беднорц ва А. Мюллер (Швейцария) лантан, барий ва мис оксиди асосида 35 К да ўта ўтказувчан бўлиб қоладиган керамика олдилар. Бундан кейин жаҳоннинг кўп илмий лабораторияларида “ўта ўтказувчанлик жазаваси” кўтарилди. Г. Беднорц ва А. Мюллер рекорди бир неча ой давомида бир неча марта орқада қолдирилди, ниҳоят 1987 йилда П. Чу раҳбарлигидаги бир гуруҳ америка олимлари ўта ўтказувчанлик ҳолатига ўтиш критик темпераси $T_c=93\text{K}$ бўлган иттрий-барий-мис оксиди таркибли керамика ҳақида хабар қилдилар. Бу ажойиб воқеа эди, чунки осон ва арзон суyoқ азотнинг қайнаш температураси 77 К бўлиб, юқоридаги керамик бирикмани ўта ўтказувчан ҳолатга ўтказиш учун шу суyoқ азотнинг ўзи кифоя бўлади. Келажақда ўта ўтказувчан материалларнинг техникада кенг қўлланилиши имконияти очилди.

II. Чу ва ундан кейин бошқалар синтез қилган керамикада итрий Y, барий Ba ва мис Cu учун мос равишда 1:2:3 нисбатдаги таркиб аниқланган. Шунинг учун бу керамикани "1:2:3" керамика деб ҳам аталади. Y⁺⁺⁺ ва B⁺⁺ топилган зарядлар ва миснинг имконий Cu['], Cu⁺⁺, Cu⁺⁺⁺ зарядлари бўлишлиги кўрсатадики, мазкур бирикма атомлари гуруҳида гула мусбат заряд 10 дан 16 гача бўлиши мумкин. Кислороднинг заряди -2 га тенг, мусбат ва манфий зарядлар сони тенг бўлиши керак. Шунинг учун бирикмада 6 та металл ионига 8 тача кислород атоми тўғри келиши лозим. Шу мулоҳазалардан 1:2:3 бирикманинг кимёвий ифодаси YBa₂Cu₃O_{6.5} бўлишлиги аниқланган.

1:2:3 бирикмалар перовскит тузилишга эга бўлишлиги ишончли тасдиқланган.

Y-Ba-Cu-O ўта ўтказгичнинг хусусияти — қатламдорликдир: икки йўналишда панжара даври 0.28 нм, учинчи йўналишда эса 1.2 нм. Асосий ўтказувчанлик мис-кислород қатламига тўғри келади, бунинг сабаби мис атомлари электронлари d-қобилининг кислород атомлари электронлари p-қобили билан устма-уст тушишидир. Аммо, аниқланган мазкур қатламдор тузилиш тасвирланаётган ҳодисани физик нуқтаи назардан гула тушиниб олиш учун етарли эмас.

Сийрақ ер элементлари атомларининг, кислороднинг бу бирикмалари ўта ўтказувчанлигига қўшадиган ҳиссасини аниқлаш масаласини ечиш зарур. Керамик ўта ўтказгичларда (Купер) электронлар жуфтлари бу хоссани келтириб чиқариши исботланган, ammo электронлараро тортишиш кучлари табиати ҳали аниқ эмас.

Юқори температурали ўта ўтказувчанлик қўлланиши мумкин соҳалардан бири электрон техникадир. Бу асосда интеграл схемаларда элементлари зичлигини 10⁸/см³ га етказиш мумкин.

Транспорт соҳасида ҳам ўта ўтказувчанлик катта самара беради. Келажакда ўта ўтказувчан материалдан электр ҳаракатлантиргич ясаиш мумкин. Унинг ҳажми ўшандай қувватли одатлагисидан 10 марта кичик бўлади.

Материаллардан магнит осмали транспорт, электро энергия жамгаргичлар, МГД-генераторлар ва электр энергияни узатиш йўллари ишлаб чиқишда фойдаланса бўлади.

Янги материаллар қилириш ишлари ҳам давом этмоқда. Висмут ва таллий асосида (Bi-Sr-Ca-Cu-O) ва (Ti-Ba-Ca-Cu-O) бирикмалар кашф қилинди.

Бу соҳада назарий ва экспериментал тадқиқотлар жадал олиб борилмоқда, бинобарин, янги ажойиб кашфиёт ва қўлланишларни кутиш мумкин.

Композицион материаллар

Композицион материаллар (композитлар) бирор асосий модда ичида бошқа модданинг толалари ёки зарралари муайян тарзда тақсимланган материалдир. Тақсимланган моддани арматура дейилади. Арматура тартибли ёки тартибсиз жойлашган бўлиши мумкин.

Композитларни ишлаб чиқиш мақсадлари қуйидагилардан иборатдир. Техника ва технологияда мустаҳкамлиги, қаттиқлиги, иссиқликка бардошлиги, кимёвий таъсирга барқарорлиги юқори даражада бўлган материаллар керак. Бунга эришиш учун даврий системанинг ўртасида жойлашган элементлар - C, Al, Si, O, N лардан фойдаланилади, улар ўзаро мустаҳкам барқарор боғланган бирикмалар ҳосил қилади. Бу бирикмалар мисоллари: кремний карбиди SiC, нитриди Si₃N₄, оксиди SiO₂, алюминий оксиди Al₂O₃. Агар уларни майда зарралар ёки ингичка толалардан тайёрланса, мустаҳкамлиги анча ортади.

Масалан, ойна шишаси мўрт модда, аммо шиша тола чўзилишга нисбатан жуда мустаҳкам бўлади.

Толаларнинг энг катта имконий мустаҳкамлигидан фойдаланиш мақсадида уларни асосий модда ичига жойланади, бунда асосий модда толаларни бир-бирига бирлаштириб, материалга қаттиқ шакл беради. Шунинг учун тола иплар иншоотлар, қурилмаларда ишлатиладиган композитларнинг муҳим таркибий қисми бўлади. Толаларнинг l узунлиги уларнинг d диаметридан анча катта бўлиши керак ($l/d > 100$). Узун толалардан фойдаланишда синергизм ҳолисаси юз беради. Синергетика ички тескари боғланишли системаларда ўз-ўзини бошқаришни ўрганадиган фан. Композит ҳолида синергизм толанинг асосий модлага (матрицага) ва асосий модданинг толага таъсиридир. Агар чўзиш деформацияси вақтида тола узилса, асосий модда бу

узилиш жойларини қисали ва тола қисқа толалардек ишлай беради. Шундай қилиб композитларни тайёрлашнинг асосий мақсади ундаги толаларнинг мустақамлигини сақлашдир. Умуман, композитлар уларни таркиблаган қисмларга нисбатан юқори сифатли бўлмоғи керак.

Композитлар таркиби қандай танланади?

Композитнинг муайян температуралар оралиғида ишлай олиш қобилиятини таъминлайдиган асосий модда ва арматурани танлаш энг муҳим вазифадир.

200°C дан паст температураларда ишлайдиган композитларни тайёрлашда полимер моддалар қўлланади. Масалан, шишапластик композит полиэфир смола ичида тақсимланган қисқа шиша толалардан иборат. Бу композит автомобил, кема ва турли асбоблар танасини тайёрлашда ишлатилади.

Терморреактив пластиклар деб аталадиган композитлар полимерлар асосида тайёрланган бўлиб, уларда молекуляр занжирлар орасидаги кўндаланг боғланишлар қаттиқ уч ўлчовли тўр шаклидаги молекуляр тузилишни ҳосил қилади. Уларнинг мисоллари — эпоксид смолалар, 350°C гача қиздиришга чидайдиган полимер смолалар.

Юқори температураларда ишлайдиган композитлар учун асосий модда (матрица) сифатида металллар олинади. Металл моддаси, иссиқликка чидамлиликтан ташқари, толалар мустақамлигига мустақамлик қўшади, металлнинг пластиклиги композитга қайишқоқлик хоссасини беради.

Жуда юқори температураларда керамик матрицалар қўлланади. Уларга киритилган толалар керамикада дарзларнинг катталашиб кетишига тўсиқлик қилади.

SiC , Si_3N_4 , Al_2O_3 моддалар асосий қилиб олинса, улар композитнинг ишлаш температурасини 1700° С гача кўтареди. Карбон асосидаги композитлар юқори қаттиқликка эга, кам ғовақлик бўлади. Бунда матрица сифатида аморф карбон олинса, арматура толалари кристалл карбон — графитдан бўлса, бу композит 2500°C гача чидаш беради.

Учувчи аппаратлар учун материалнинг σ мустақамлигини ошириш, ρ зичлигини камайтириш зарур, яъни σ/ρ нисбатининг катта бўлишига эришиш керак.

Карбон матрицали композитнинг баъзи камчиликларини бартараф қилиш учун уни чидамлироқ SiC юққа қатлам

билан қопланади. Бу композит «Шаттл» космик кемасида қўлланилган.

Демак, матрица моддаси биринчи навбатда композитнинг ишлаш температурасига қараб танланади.

Ҳар қандай моддадан тайёрланган толалар мустақкам бўлади, аммо бошқа хоссалари кучли даражада фарқ қилиши мумкин. Масалан, шиша толаларнинг чўзишга нисбатан мустақкамлиги карбон толалариникидек, аммо уларнинг қаттиқлиги ҳар хил: шиша тола кучли чўзилади, карбон тола деярли чўзилмайди. Шунинг учун катта юкламалар берилганда қаттиқлиги талаб қилинганда шиша толани қўллаб бўлмайди.

Зарбаларга дучор бўлиб турадиган буюмлар, қурилмаларда масалан, ҳарбий техникада ишлатиш учун юқори зарбавий мустақкамликка эга бўлган композитлар қўлланади. Толани танлашда унинг матрица моддаси билан кимёвий ҳаммавжуд бўлишлиги муҳим. Аммо, композит тайёрлашда толани бузадиган кимёвий реакциялар юз бермаслиги керак. Тола моддаси ҳали қотмаган матрица моддасини яхши ҳўллайдиган бўлса, юқори сифатли композит ҳосил бўлади. Ҳўлланишни яхшилаш мақсадига ҳам тола, ҳам матрица билан ўзаро таъсирлашадиган махсус қатламлар ўтқазилади.

Демак, тола моддасини танлашда қуйидаги тўртта қоидага риоя қилинади: композитнинг мустақкамлиги; композитнинг қаттиқлиги; толанинг ҳўлланиши ва унинг матрица суюлмасида кимёвий барқарорлиги.

Композитнинг тузилиши масаласи ҳам жуда муҳим, унинг геометрик ички тузилишига қараб хоссалари ҳам ҳар турли бўлади.

Композит арматураси шакли композит мустақкамлигининг толалар йўналганлигига, толалар эгиловчанлигига боғлиқлиги, арматурани тайёрлаш ҳаражатига қараб танланади.

Шу талаблар асосида композитлар ишлаб чиқариш технологияси усуллари яратилган.

Масалан, металлнинг юпқа қатлами ёки кукуни тола устига ўтқазилади ва металлнинг суюлиши температурасидан пастроқ температураларда қиздирилади, диффузия жараёни оқибатида металл матрицаси тола билан боғланади. Бошқа бир неча усуллар ҳам мавжуд.

Саволлар

1. Қандай моддалар керамик моддалар бўлади?
2. Керамик ва металл қаттиқ жисмларнинг барбод бўлиши механизмлари фарқи нимадан иборат?
3. Керамикани мустаҳкамлашнинг қандай усуллари бор?
4. Керамика қайси соҳаларда қўлланилади?
5. Ферритлар қандай моддалар?
6. Сегнетоэлектрик ҳодисаси нимадан иборат?
7. Юқори температурали ўта ўтказувчанлик ҳодисаси қандай моддаларда мавжуд бўлади?
8. Ўта ўтказувчанлик қўлланадиган соҳалар ҳақида сўзлаб беринг.
9. Композитни таърифланг.
10. Композит таркиби қандай қоидалар асосида танланади?

XIV БОБ

ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРДА ҲАЖМИЙ ЎЗГАРИШЛАР

Қаттиқ жисмларда ҳажмий ўзгаришлар фазавий ўтишларга мансубдир. Фазавий ўтиш нуқтасида фазалар мувозанати шарти кимёвий потенциаллар тенглигидан иборат, яъни $\mu_1 = \mu_2$. Маълумки, I жинс фазавий ўтишларда модданинг зичлиги ва термодинамик функциялар ўтиш нуқтасида сакраб ўзгаради, уларда ўтиш иссиқлиги ажралади (ютилади). Бундай ўтишлар мисоллари: суюлиш, бугланиш, кристалланиш, кристалларнинг шакл ўзгаришлари.

II жинс ўтишларда иссиқлик ажралмайди (ютилмайди), термодинамик функцияларнинг ўзи ўтиш нуқтасида сакраб ўзгармайди, балки уларнинг ҳосилалари бўлмиш иссиқлик сизими ($c_p = d^2\Phi/dT^2$), қисилувчанлик (dV/dP), иссиқликдан кенгайиш (dV/dT) ва бошқалар сакраб ўзгаради. Бундай ўтишларга мисоллар: температура ўзгариши билан ферромагнетикнинг парамагнетикка аврилиши, суюқ гелийнинг ўта оқувчан ҳолатга ўтиши.

Қаттиқ жисмларда ҳажмий ўзгаришлар кимёвий таркиб ўзгармаган ҳолда ва кимёвий таркиб ўзгарган ҳолда юз бериши мумкин.

Аллотропик аврилишлар

«Аллотропия» сўзи юнон тилидан олинган ва «бошқа шакл» деган маънони англатади. Аллотропия (полиморфизм) атамаси кимёвий элемент ёки қаттиқ бирикмаларнинг бир неча шаклда (модификациясида) бўлишлигини тавсифлаш учун киритилган.

Моддаларнинг аллотроплари (шакллари) бир-биридан кристаллда атомларнинг турлича жойлашиши билан фарқланади, бунда

- 1) молекулаларда атомлар сони ҳар хил бўлади;
(мисол: олти ва саккиз атомли олтингүгүрт молекуласи);

2) молекуладаги атомлар сони бир хил бўлгани ҳолда молекулаларнинг ўзаро йўналиши турли (мисол: олтингургуртнинг ромбик ва моноклин шакллари);

3) металллар кристалларида атомлар қатламларининг тахланиш кетма-кетлиги бошқача бўлади.

Муайян температурада (Ўтиш температурасида) бир хил аллотропик шаклдан иккинчисига ўтиш содир бўлади.

Масалан, олтингургурт $T_c=368.5K$ да ромбик кристалл шаклидан моноклин кристалл шаклига ўтади, бунда ўтиш иссиқлиги $90 \text{ кал}/(\text{г-атом})$ га тенг бўлади, кимёвий таркиб ўзгармайди. Ички энергия кристалл панжарасида атомлар жойлашиши функцияси, яъни кимёвий боғланиш функциясидир. Шунинг учун аллотропик аврилишларда (ўтишларда) унинг ўзгариши эвазига иссиқлик ажралади (ютилади), демак, бу жараёнлар I жинс фазавий ўтишларга мансуб.

Мана шунақа аллотропик аврилишлар Ti , Zr , Hf , Cr , Fe , Mn , Co , Tl элементлар кристалл панжараларида ҳам бўлади.

Кристалл тузилиши ўзгариши билан бир қаторда кимёвий боғланишлар табиати ҳам ўзгариши мумкин. Бунда бир аллотропик шаклда қаттиқ жисм металл ўтказувчанликка, бошқа шаклда эса ярим ўтказгич ёки диэлектрик хоссаларига эга бўлиши мумкин. Масалан, қалайи Sn ни олсак, у юқори температураларда тетрагонал панжарали (ва координацион сони $K=6$ бўлган) асл металл (оқ қалайи) бўлади, $t=13.2 \text{ }^\circ\text{C}$ да оқ қалайи кулранг қалайинга аврилади, кейинги эса кубик шаклдаги олмос ($K=4$) панжарасига эга бўлган ярим ўтказгичдир.

Se селеннинг учта аллотропик шакли бор: кулранг селен — ярим ўтказгичдир, қизил ва қора селенда ярим ўтказгичлик хоссаси йўқ, қизил селен моноклин тузилишга эга, қора селен эса аморф моддадан иборат бўлади.

Кимёвий боғланишлар ўзгарадиган аллотропик аврилишлар олтингургурт S , маргимуш As , фосфор P , карбон C (графит ва олмос) элементларга ҳам хосдир.

Мартенсит аврилишлар

Баъзи металллар ва қотишмаларда ҳажмий ўзгариш алоҳида хусусиятга эга. Бундай ўзгаришлар металллар ва қотишмалар технологиясида муҳим ўрин тутаети. Мартенсит номи машҳур металлург Мартенс номидан келиб чиққан.

Мартенсит аврилишлар (ўзгаришлар, ўтишлар) бирор температурада тугалланмайди, албатта қатъий термодинамик маънода қайтмас, аммо тузилиш маъносида қайтар жараёнлардир.

Айтайлик, қаттиқ жисм (металл) икки аллотропик шаклда бўлиши мумкин. Агар юқори температурада мавжуд бўладиган аллотропа шаклдаги жисмни T гача совутсак, бунда иккала шаклнинг эркин энергиялари бирдай бўлса, у ҳолда паст температурали шаклга ўтиш юз беради. Қаттиқ жисмни пастроқ мартенсит аврилиш (ўтиш) бошланадиган T_m – температурагача совутиш зарур. Агар T_m га етганда совутиш тўхтатилса, бу ҳолда ўтиш бўлмайди. Агар T_m дан кейин совутиш яна давом эттирилса, паст температурали фаза (шакл) ҳосил бўла беради. Ниҳоят қандайдир T'' паст температурада ўтиш (аврилиш) таъмомила тугалланади. Юқори температурали фазага (шаклга) тескарича ўтиш ҳам мумкин, лекин, температуралар оралиқлари олдинги йўналишда ўтишдан фарқ қилади, яъни бунда гистерезис пайдо бўлади – бу ҳодиса мартенсит ўтишлар (аврилишлар)нинг муҳим хусусиятидир.

Мартенсит аврилишларни диффузиясиз ўтишлар ҳам дейилади, чунки улар бир ёки бир неча текисликларнинг жуда кичик (атомлараро масофасининг улушлари чамасидаги) масофага бир вақтда силжишларидан иборат, бунда текисликлар орасидаги боғланиш бузилмайди. Бу мазкур ўтишларнинг яна бир хусусиятидир. Атомлар текисликларнинг тузилишининг унча катта бўлмаган пластинасимон бузилишига олиб келади. Намуна сиртидаги бу пластинкасимон шакллар микроскопда яхши кўринади. Масалан пўлатлар тобланганда, яъни юқори температурадан бошлаб уларни тез совутилганда ёки марказлашган куб панжарали γ -Fe даги карбон С нинг қаттиқ эритмаси тетрагонал панжарали мартенсит шаклга ўтади. С нинг миқдори қанча кўп бўлса, тетрагоналлик даражаси ортиқ бўлади. Бир вақтнинг ўзида мартенсит пўлатнинг мустақамлиги ортади.

Бир негиз тоза металллар (Fe, Co, Ti, Li, Na ва б.) ва кўп қотишмалар (Fe-Ni, Fe-Mn, Ti-Mn, Au-Cd, Mn-Cu ва б.) да мартенсит аврилишлар бўлишлиги маълум.

Ўта тўйинган эритманинг парчаланиши

А эритувчида В модда эриган бўлсин. Юқори T_1 температурада В модданинг эритмада мувозанатий зичлиги C_1 етарлича катта. Температура T_2 гача пасайганда система C_2 гача камайган зичликли ҳолатга ўтади.

В эрувчиининг зичлиги камайиши ҳисобига “чўкма” ҳосил бўлади, бу эса ўта тўйинган эритма парчаланиди демакдир.

Термодинамик таҳлилнинг кўрсатишича, икки фаза аралашмасининг барқарор бўлиши учун бу аралашманинг эркин энергияси энг кичик бўлиши керак.

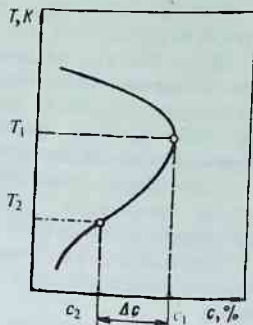
А ва В таркибловчидан иборат $A_{1-x}B_x$ ($x < 1$ – маъкур таркибловчининг улуши) бўлган эритмада барқарорлик температурага боғлиқ, чунки эркин энергия температура функцияси бўлади.

Температура T ўзгарганда (пасайганда) x улуш ўзгаради, бу эритманинг қисман парчаланиши, оқибатида эса томомила парчаланишга олиб келади. Бундан парчаланишнинг *икки тури мавжуд: активацион, активационмас парчаланиш.*

Биринчи ҳолда эритма парчаланиши учун қандайдир миқдорда қўшимча энергия сарфлаш (энергетик тўсиқдан ўтиш) зарур бўлади. Шунинг учун дастлабки эритма иккита эритмага бўлиниши мумкин.

Иккинчи ҳолда парчаланиш энергиянинг пасайиши билан боради. Мўайян шароитда активацион парчаланиш ноактивацион парчаланишга ўтади. Қаттиқ эритма парчаланиши жараёнининг бир неча соддаллантирилган тасаввурлари бор.

Қаттиқ эритманинг парчаланиши унинг ичида янги фаза марказлари (ҳомиртурувчилари)нинг пайдо бўлишидан бошланади. Ҳомиртурувчининг (марказнинг) ўлчами бирор критик r_c қийматга етгунча эркин энергия ошади, бундай марказлар қайта эриб кетишга мойин. Аммо, ўлчами r_c дан катта бўлиб



14.1- чизма. Қаттиқ эритманинг температура пасайганида парчаланишнинг тушунтирадиган чизма.

олган марказлар ўса боради, чунки бу ҳолда кристаллнинг эркин энергияси камай боради. Энг биринчи марказ сифатида ҳар қандай нуқсонни қабул қилса бўлади, уларнинг ўлчами панжара доимийси (ангстрем) тартибида бўлиб, улар қаттиқ эритмада ҳамма вақт мавжуд бўлади. Атом ўлчамидаги бундай марказларни «*сегрегатлар ёки кластерлар*» дейилади.

Умуман айтганда, эритманинг парчаланиши — кўп босқичли жараён.

Ярим ўтказгич ва металл қаттиқ эритмалар орасида жуда муҳим тафовут бор. Ярим ўтказгичларда ажралиб чиқадиган атомлар ва нуқсонлар зичлиги таққосланурли металлларда эса ажралиб чиқаётган атомлар миқдори нуқсонлар миқдоридан анча катта бўлади. Бундан муҳим фарқлар келиб чиқади.

Парчаланиш марказларининг ўсиш жараёни (кинетикаси) асосан янги-янги атомларнинг марказ сиртига келиб қўшилиши тезлиги билан боғланган.

Парчаланиш оқибатида пайдо бўлаётган янги β фазанинг ҳажмий улуши қуйидаги кинетика тенгламаси (Авраам тенгламаси)

$$\xi = \frac{V\beta}{V} = 1 - \exp(-K(t)^n)$$

орқали ифодаланади, бунда K — доимий кўпайтувчи, n — ўтиш механизмига боғлиқ кўрсаткич.

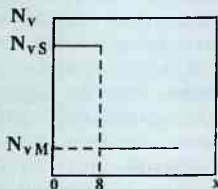
Қатъий назарий таҳлил мақсадида

$$\partial c(r, t) / \partial t = D\nabla^2 c$$

диффузион тенгламанинг турли ҳоллари учун ечимларини Авраам тенгламасига келтириш мумкин эканлиги аниқланди.

Яна бир ҳодиса устида тўхталамиз. Кристаллни механик иш-

ловга дучор қилинганда — уни шилганда ва сайқаллаганда сиртий қатлам бузилган ва ортиқча (ҳажмдагига нисбатан) вакансиялар билан тўйинади. Оқибатда кристаллда дастлабки погонасимон вакансиялар тақсимоти ҳосил бўлади: ҳажмда мувозанатий вакансиялар қаттиқ эритмаси, δ -қатламда эса номувозанатий вакансиялар қаттиқ эритмаси мавжуд бўлади.



14.2-чизма. Сиртий δ -қатламини тўйинтиргандан сўнг вакансиялар тақсимоти.

Албатта, ортикча вакансиялар ҳосил бўлиши ҳамон уларнинг бугун кристаллда тенглашишига томон йуналган жараён бошланади. Бу жараёни икки босқичга ажратиш мумкин. Биринчи босқичда вакансияларнинг ўта тўйинган эритмаси парчаланadi ва бир вақтда уларнинг диффузияси боради. Кўп вакансиялар коваклар ҳосил қилишга кетади, иккинчи босқичда қолган номувозанатий вакансиялар диффузияланади ва майда коваклар камайиши ҳисобига йирик коваклар қупаяди. Бу босқич охирида ортикча вакансиялар δ қатламдан чиқади, кристаллда коваклар ва вакансияларнинг мувозанатий ҳолати ўрнашади.

Қаттиқ жисмларда температурага боғлиқ бўлмаган фазвий аврилишлар

Қаттиқ жисмдаги ҳажмий ўзгаришларга босим ҳам катта таъсир қурсанади. Катта босимлар ҳосил қилиш техникаси намунага ҳам ҳар тарафлама (гидростатик), ҳам бир тарафлама (бир ўқли) босим бериш имконини яратган.

Катта энергияли зарралар (γ - квантлар, нейтронлар ва б.) билан нурлаганда, механик таъсирлар оқибатида ҳам ҳажмий ўзгаришлар юз беради.

Нурлаш натижасида нуқтавий нуқсонлар ҳосил бўлиши бизга маълум: катта энергияли зарра ўз йўлида вакансиялар ва тугунлараро атомлар пайдо қилади. Бу зарра йўлининг охирида у ўз энергиясини тўла сарфлаб бўлганда кристаллда диаметри 5–10 кристалл панжараси доимийен чамаанда бўлган сийракланган зона пайдо бўлади, бу соҳада панжара тартибсизланади, энг чегаравий ҳолда тўла аморфланиш вужудга келади. «Яхланган» ҳолатда бу соҳа узоқ мавжуд бўлиши мумкин, лекин кристалл қиздирилганда бу соҳалар ўз ҳолига қайтади, кристалл мувозанатий ҳолатини олади.

Механик таъсирлар (шиқаланиш, майдаланиш, зарб ва б.) кристаллда панжаранинг кучли даражада тартибсизланишига ҳатто аморфланишига олиб келади. Механик таъсирлар оқибатида кристалл панжараси бир кўринишдан бошқа кўринишга ўтиши мумкин. Масалан, шиқаланиш оқибатида олмоссимон панжарали кремний Si кристалли аморф ҳолатга ўтиши, гексагонал панжарали кобальт Co ёки марказлашган куб панжара бўлиб қолиши мумкин.

Энди қаттиқ жисмларда юз берадиган ҳажмий ўзгаришлардан амалда қандай фойдаланилади деган саволга қисқача жавоб берамиз.

Қўп технологик жараёнларни амалга оширишда температура, босим, механик ишлов ва бошқа таъсирларни ҳисобга олишга тўғри келади.

Олдин айтганимиздек, мартенсит аврилишлар карбонли пўлатларнинг термоншловида кенг қўлланилади. Қотишмада карбоннинг миқдори 2% (масса бўйича)дан ошмайди. Энг муҳими пўлатда карбон графит ҳамда темир карбиди Fe_2C кўринишларда бўлади. Агар пўлатни ҳосил қилиш ёки термоишлов беришда кескин тоблаш қилинса, оралиқ фаза мартенсит деформацияланган ҳажмий марказлашган куб панжарали бўлиб, пўлатнинг мустаҳкамлигини анча оширади. Бу ҳолат хона температурасида узоқ вақт мавжуд бўлиши мумкин.

Металл қотишмаларнинг дисперсион қаттиқланиши ҳодисаси қаттиқ эритманинг парчаланиши вақтида юз берадиган ажратмалар ўлчамлари ошган сари қотишманинг қаттиқлиги ошишидан иборатдир. Мустаҳкамлик орта боради, максимумдан ўтади, кейин ажралаётган иккинчи фаза қириндилари ўлчамлари ортиши билан мустаҳкамлик камая боради. Бу ҳодиса дюралюминда ($Al+4\%Cu+0,5\%Mg$) юз беради. Бу қотишманинг мустаҳкамлик хоссалари хона температураси ёки ундан юқорида вақт ўтиши билан яхшиланиб боради. Бу жараёни қотишманинг қариши деб аталади. Мустаҳкамланишнинг сабаби: қаттиқ эритма парчаланганда қотишманинг тузилишида панжарани мустаҳкамловчи оралиқ фазанинг вужудга келишидир.

Қўп қотишмаларда дисперсион қаттиқланиш хона температурасидан анча юқорида температураларда кузатилади. Шунинг учун бу температурадан бошлаб (паст томонга) тобланса паст температураларда қотишмани мустаҳкамланган ҳолатда узоқ сақлаш ва ундан амалий мақсадларда фойдаланиш мумкин.

Саволлар ва масалалар

1. Қаттиқ жисмларда ҳажмий ўзгаришларнинг қандай асосий қўринишлари бор?
2. 1 ва 2 жинс фазавий ўтишлар бир-биридан қандай фарқ қилади?
3. Аллоптроп ўзгаришларнинг моҳияти нимадан иборат?
4. Мартенсит ўзгаришларнинг моҳияти нимадан иборат?
5. Температурага боғлиқ бўлмаган фазавий ўзгаришлар ҳақида нималарни биласиз?
6. Ҳажмий аврилишлардан амалда қандай фойдаланилади?

Баъзи физик катталиклар

Катталиклар	Белгиси	СИ тизим бирликларида	СГС бирликларида
Электроннинг тинчлик массаси	m_e	$9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$	$9,11 \cdot 10^{-28} \text{ г}$
Электроннинг заряди	e	$1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$	$4,8 \cdot 10^{-10} \text{ сгсэ}$
Планк доимийси	h	$6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Жс}$	$6,63 \cdot 10^{-27} \text{ эрг с}$
Авогадро сон	N_A	$6,02 \cdot 10^{23} \text{ мол}^{-1}$	$6,02 \cdot 10^{23} \text{ мол}^{-1}$
Болцман доимийси	k	$1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Ж К}^{-1}$	$1,38 \cdot 10^{-16} \text{ эрг К}^{-1}$
Газ доимийси	$R = k N_A$	$8,3142 \text{ Ж мол}^{-1} \text{ К}^{-1}$	$8,31 \cdot 10^7 \text{ эрг мол}^{-1} \text{ К}^{-1}$
Электрон-вольт	эВ	$1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Ж}$	$1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$
Бор магнетони	$\mu_B = \frac{eh}{2m_e}$	$9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Ж Тл}^{-1}$	
Вакуумда ёруклик тезлиги	c	$3 \cdot 10^8 \text{ м/с}^{-1}$	$3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}^{-1}$
Вакуумнинг диэлектрик сингдирувчанлиги	ϵ_0	$8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф м}^{-1}$	
Вакуумнинг магнит сингдирувчанлиги	μ_0	$1,26 \cdot 10^{-6} \text{ Гн м}^{-1}$	
1эВ энергияли фотон тулқин узунлиги	$\lambda_{\text{ф}}$	$1,24 \cdot 10^{-6} \text{ м}$	$1,24 \cdot 10^{-8} \text{ см}$
1эВ энергия фотон такрорчилиги	$\nu_{\text{ф}}$	$2,42 \cdot 10^{14} \text{ Гц}$	$2,42 \cdot 10^{14} \text{ Гц}$

Бу жадвалда келтирилган қийматлар вергулдан кейинги икки рақамгача аниқликда олинган.

АДАБИЁТЛАР

1. В. И. Фистуль, «Физика и химия твердого тела» (икки жилдли), Москва «Металлургия» 1995 г.
2. Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. Москва, «Мир», 1974 г.
3. Ч. Киттел. Введение в физику твердого тела. Москва, Физматгиз, 1993 г.
4. Б. Н. Бушманов, Ю. А. Хромов «Физика твердого тела», Москва, «Высшая школа», 1971 г.
5. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, «Физика твердого тела», (икки жилдли) Москва, «Мир», 1979 г.
6. Г. С. Жданов, А. Г. Хунджуа. Лекции по физике твердого тела. Москва, МГУ, 1988 г.
7. С. З. Зайнабиддинов, Х. С. Далнев. Дефектообразование в кремнии. Тошкент, «Университет» 1993 й.
8. С. З. Зайнобиддинов, А. Тешабоев. Ярим утказгичлар физикаси. Тошкент, «Ўқитувчи», 1999 й.
9. Дж. Блейкмор. Физика твердого тела. Москва, «Мир», 1988
10. Задачи по физике твердого тела (Г. Дж. Голдсмит тахрири остида). Москва, «Наука», 1976 г.
11. Ленч, Николаидес. Задачи по физической электронике.
12. Ф. Ф. Волкенштейн. Физико-химия поверхности полупроводников. Москва, «Наука», 1973 г.
13. А. И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников, Москва, «Наука», 1978 г.
14. Ф. Зейтц. Физика металлов. Москва-Ленинград, ГИТТЛ, 1947 г.
15. Г. Фрелих. Теория диэлектриков. Москва, ИЛ, 1960 г.
16. Дж. Барфут. Введение в физику сегнетоэлектрических явлений. Москва, «Мир», 1970 г.
17. Я. С. Уманский, Ю. А. Сканоу. Физика металлов. Москва, Атомиздат, 1978 г.
18. С. С. Горелик, М. Я. Дашевский. Материаловедение полупроводников и диэлектриков. Москва, «Металлургия», 1988 г.
19. И. С. Желудев. Физика кристаллических диэлектриков. Москва, «Наука», 1968 г.
20. С. В. Вонсовский. Современное учение о магнетизме. Москва, ГИТТЛ, 1953 г.
21. Г. Сликтер. Основы теории магнитного резонанса. М. «Мир», 1967 г.
22. Ю. И. Аксентьев ва бошқалар. Физика твердого тела (спен-практикум). Из-во МГУ, 1982 г.

МУНДАРИЖА

Сўз боши.....	3
I БОБ. ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРНИНГ ТУЗИЛИШИ ВА ТУРЛАРИ	5
1.1. Кристалл қаттиқ жисмлар.....	6
1.2. Кристалл панжараси.....	7
1.3. Кристалларда симметрия.....	7
1.4. Миллер индекслари.....	12
1.5. Кристалл атомларининг ва молекулаларининг боғланиш турлари.....	14
1.6. Кристалларни устириш.....	22
1.7. Полиморфизм.....	23
1.8. Кристалларда рентген нурлари дифракцияси.....	24
1.9. Тескари панжара.....	26
1.10. Бриллюэн зонаси.....	27
II БОБ. КРИСТАЛЛ ПАНЖАРАСИ ТЕБРАНИШЛАРИ	29
2.1. Чизигий содда панжара атомлари тебранишлари.....	29
2.2. Чизигий мураккаб панжарада тебранишлар ва тўлқинлар.....	33
2.3. Уч ўлчовли мураккаб кристалл панжараси атомлари тебранишлари.....	38
2.4. Изотроп континуум тақрибида кристалларда тебраниш- лар ва тўлқинлар.....	42
2.5. Кристалл панжараси тебранишларининг квантланиши. Фононлар.....	48
Масалалар ва саволлар.....	51
III БОБ. ФИЗИК СТАТИСТИКА ҚОНУНЛАРИ	52
3.1. Тасодифий катталикларнинг ўртача қийматлари.....	54
3.2. Тақсимот функциялари мисоллари.....	56
3.3. Бир неча тасодифий катталик учун тақсимот функцияси..	57
3.4. Максвелл тақсимоти.....	58
3.5. Классик статистик физиканинг асосий тасавурлари.....	62

3.6.	Гиббснинг каноник тақсимооти.....	64
3.7.	Гиббснинг катта каноник тақсимооти.....	69
3.8.	Квант статистика асослари.....	70
3.9.	Қора нурланиш.....	75
	Саволлар ва масалалар.....	77

IV БОБ. ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРДА ИССИҚЛИК ХОДИСАЛАРИ

78

4.1.	Иссиқлик сизимининг классик назарияси.....	78
4.2.	Кристалл панжараси иссиқлик сизимининг квант назарияси.....	81
4.3.	Кристалл қаттиқ жисмнинг панжаравий иссиқлик ўтказувчанлиги.....	86
4.4.	Қаттиқ жисмларнинг иссиқликдан кенгайиши ва узайиши.....	89
	Саволлар ва масалалар.....	93

V БОБ. ИДЕАЛ КРИСТАЛЛДА ЭЛЕКТРОНЛАРНИНГ ЭНЕРГИЯЛАРИ СПЕКТРИ

94

5.1.	Кристалл учун Шредингер тенгламаси. Адиабатик тақриб.....	94
5.2.	Хартри-Фок усули. Бир электронли яқинлашиш.....	96
5.3.	Даврий электр майдонда ҳаракатланаётган электрон масаласи.....	99
5.4.	Кучсиз ва кучли боғланган электронлар тақриблари.....	101
5.5.	Крониг-Пенни модели.....	105
5.5.	Идеал кристаллда электронлар энергиялари спектри тўғрисидаги умумий хулосалар.....	110
5.6.	Электронларнинг кристаллдаги эффектли массаси. Ковак. Электрон энергияси ва импульси.....	112
5.7.	Энергия зоналари. Металлар. Ярим ўтказгичлар. Диэлектриклар.....	115
	Саволлар ва масалалар.....	120

VI БОБ. ҲАҚИҚИЙ КРИСТАЛЛ ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРДАГИ НУҚСОНЛАР

121

6.1.	Кристаллардаги нуқсонлар ҳақида умумий мулоҳазалар.....	121
6.2.	Нуқтавий нуқсонлар.....	124
6.3.	Қаттиқ жисмларда чизигий нуқсонлар.....	140
6.4.	Қаттиқ жисмларда ясси нуқсонлар.....	144
6.5.	Қаттиқ жисмларда ҳажмий (макроскопик) нуқсонлар.....	146
6.6.	Нуқсонлар диффузияси.....	151
	Савол ва масалалар.....	156

**VII БОБ. АМОРФ ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР.
СУЮҚ КРИСТАЛЛАР**

158

7.1	Аморф қаттиқ жисмлар	159
7.2	Гидриланган аморф кремний (α - Si : H)	161
7.3	Суюқ кристаллар	163
	Саволлар	168

**VIII БОБ. ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР СИРТИДАГИ
ҲОДИСАЛАР**

169

8.1	Умумий маълумот	169
8.2	Сиртнинг тузилиши. Энергетик ҳолатлар	170
8.3	Ҳулланиш ва ёнилиб оқиш ҳодисалари	173
8.4	Электронлар эмиссияси ва сиртги ионлаш	174
8.5	Қаттиқ жисмлар сиртида адсорбция ҳодисаси	176
8.6	Сиртги диффузия	179
	Назорат учун саволлар	182
	Масалалар	182

IX БОБ. ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР ДЕФОРМАЦИЯСИ

184

9.1	Бир ўлчовли деформация	185
9.2	Икки ўлчовли деформация	185
9.3	Уч ўлчовли деформация	188
9.4	Кучланиш тензори	189
9.5	Деформация билан механик кучланиш орасидаги боғланиш. Умумлашган Гук қонуни. Эластиклик модуллари	191
9.6	Изотроп қаттиқ жисмининг эластиклик модуллари	194
9.7	Содда деформация ва уларда турли эластиклик модуллари орасидаги боғланиш	195
9.8	Кичик деформациялар энергияси	199
9.9	Тензоқаршилик ҳодисаси	201
	Саволлар ва масалалар	202

X БОБ. МЕТАЛЛАР

203

10.1.	Металларнинг электр хоссалари	203
10.2.	Металларда иссиқлик ҳодисалари	216
10.3.	Металларнинг зоналар назарияси	226
10.4.	Металларда электрон эмиссияси	228
10.5.	Фотоэмиссия (ташқи фотоэффект)	232
10.6.	Металларнинг магнит хоссалари	233
10.7.	Де Гауз – Ван Алфен эффекти	237

10.8.	Электрон – парамагнит резонанс (ЭПР).....	238
10.9.	Ядромагнит резонанс.....	239
10.10.	Металларнинг электромагнит тулқинлар билан узаро таъсири.....	239
10.11.	Циклотрон резонанс.....	240
10.12.	Металларда плазма тебранишлари.....	241
	Саволлар ва масалалар.....	243

XI БОБ. ЯРИМ УТКАЗГИЧЛАР 244

11.1.	Ярим ўтказгичларнинг турлари.....	245
11.2.	Ярим ўтказгичларда хусусий ўтказувчанлик ва зоналар тузилиши.....	246
11.3.	Эффективли масса.....	249
11.4.	Хусусий ярим ўтказгичларда электронлар ва коваклар зичлиги.....	251
11.5.	Заряд ташувчилар ҳаракатчанлиги.....	254
11.6.	Ярим ўтказгичда киришмалар.....	255
11.7.	Компенсирланган ярим ўтказгичлар.....	258
11.8.	Айниган ярим ўтказгич.....	258
11.9.	Айнимаган ярим ўтказгич.....	259
11.10.	Ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги.....	260
11.11.	Ярим ўтказгичларда циклотрон резонанс.....	262
11.12.	Ярим ўтказгичларда Холл ҳодисаси.....	264
11.13.	Магнитик қаршилик ҳодисаси.....	265
11.14.	Ярим ўтказгичларда диффузион ток.....	265
11.15.	Ярим ўтказгичларнинг магнит хоссалари.....	266
11.16.	Ярим ўтказгичларда контакт ҳодисалар. Металл-ярим ўтказгич контакти.....	268
	Саволлар ва масалалар.....	274

XII БОБ. ДИЭЛЕКТРИКЛАР 276

12.1.	Диэлектрикларга онд асосий тушунчалар ва кагталиқлар.....	277
12.2.	Диэлектрикларда қутбланиш механизмлари.....	281
12.3.	Пироэлектриклар.....	288
12.4.	Пьезоэлектрик ҳодиса.....	289
12.5.	Сегнотозлектриклар.....	290
12.6.	Сегнотозэлектрик доменлар ва антисегнотозэлектрик ҳодисалар.....	292
12.7.	Диэлектрик йуқотишлар.....	293
12.8.	Диэлектриклар тешилиши (бузилиши).....	294
	Масалалар.....	296

XIII БОБ. КЕРАМИК ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР. 297
КОМПОЗИТЛАР

13.1.	Керамик материаллар ҳақида умумий маълумот.....	297
13.2.	Қурилмалар ва асбобларда қўлланиладиган керамика.....	298
13.3.	Радиоактив материаллар ва чиқиндиларни сақлайдиган контейнерлар учун керамика.....	301
13.4.	Керамик ферритлар.....	301
13.5.	Сегнетоэлектрик ва пирозэлектрик керамик материаллар...	302
13.6.	Ўта ўтказувчан керамика.....	304
	Саволлар.....	309

XIV БОБ. ҚАТТИҚ ЖИСМЛАРДА ҲАЖМИЙ 310
ЎЗГАРИШЛАР

Аллотропик аврилишлар.....	310
Мартенсит аврилишлар.....	311
Ўта тўйинган эритманинг парчаланиши.....	313
Қаттиқ жисмларда температурага боғлиқ бўлмаган фа- завий аврилишлар.....	315
Саволлар ва масалалар.....	317
Баъзи физик катталиклар.....	317
Адабиётлар.....	318

АЛИШЕР ТЕШАБОВЕВ,
СИРОЖИДДИН ЗАЙНОБИДДИНОВИЧ ЗАЙНОБИДДИНОВ,
ШУКРУЛЛО АБДУЛФАЙЗОВИЧ ЭРМАТОВ

ҚАТТИҚ ЖИСМ ФИЗИКАСИ

Тошкент — «Молия» нашриёти — 2001

Мухаррир

Ш. Миркомиллов

Техник муҳаррир

А. Мойдинов

Компьютерда саҳифаловчи

Ф. Қорахонова

Расмол

М. Одилов

Теришга берилди 02.04.2001 й. Босишга рухсат этилди 10.08.2001 й.
Бичими 60x84 ¹/₁₆. «TimesUZ» ҳарфида терилиб, офсет усулида
босилди. Босма табағи 20.3. Нашриёт ҳисоб табағи 19.3. Адади 2000
Буюртма №233. Баҳоси шартнома асосида

«Молия» нашриёти, 700000, Тошкент, Якуб Колас кучаси, 16-уй.
Шартнома №10-01.

Андоза нусха Ўзбекистон Республикаси Банк-молия
академиясининг «Молия» нашриётида тайёрланди.

«ДИТАФ» босмаҳонасида чоп этилди Тошкент ш. Олмазор куч. 171 уй.