

KRISTALL QATTI DENELEERDEGI NUQSANLAR. NOQATLIQ NUQSANLAR

Kuralbaev Jamshid Rashid ulı

Berdaq atındagi Qaraqalpaq Mämlekетlik Universiteti
Magistratura bólimi teoriyalıq fizika bağdari 1-kurs student

<https://doi.org/10.5281/zenodo.11065355>

Anotatsiya. Kristall deneler kúndelik turmis, islep shıgariw, ilim hám sanaatda keń kólemde qollanılıwi, kristall qattı denelerdegi nuqsanlar. Noqatlıq nuqsanlar.

Gilt sóz: Kristall, noqatlıq nuqsanlar, mikro nuqsanlar, ideal kristallar.

DEFECTS IN CRYSTALLINE SOLIDS. POINT DEFECTS

Abstract. Crystal bodies are widely used in everyday life, production, science and art, defects in crystalline solids. Point defects.

Key words: Crystal, point defects, micro defects, ideal crystals.

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ. ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ

Аннотация. Кристаллические тела широко используются в быту, производстве, науке и искусстве, дефекты кристаллических тел. Точечные дефекты.

Ключевые слова: Кристалл, точечные дефекты, микродефекты, идеальные кристаллы.

Qattı kristall dene hár dayım tártiplesken, yaǵníy atomlardıń dáwirlik jaylasıwında hesh qanday buzılıw bolmaǵan dene dep qaraladı. Biraq atomlar terbeliwi bunnan xabarsız edi.

Biraq haqıyqıy kristallarda hámme waqt kristall pánjeresiniń bir az muǵdarda kemshilikleri bar. Dáslep makro hám mikro nuqsanların pariqlaw lazım. Makronuqsanlar mikroskopta ańsat kórinedi. Bunday makro nuqsanlarǵa misallarmetall quymalardaǵı gewekler, darzlar, basqada zatlar qospalardıń úyindileri, polikristalldıń dánesheleri-ayırım kristall sharlardıń kórinbe shegaralarıdur. Elektronlar mikroskopiyasınıń payda bolıwı sanap ótilgen nuqsanları bir az ólshemli bolǵanda da baqlaw imkanıń beredi.

Mikronuqsanlarǵa yaki atomlar ólsheminde qaralatuǵın nuqsanlardan úsh ólshemnen (x,y,z) hesh bolmaǵanda bir kristall pánjeresiniń $a = 0,2 \div 0,5 \text{ nm}$ dawir menen salıstırıwshı bolǵan nuqsanlar say boladı. Ayırm kórinistegi nuqsanlardı úyreniwden aldin haqıyqıy kristalldı nuqsanlarsız (ideal) kristalldan pariqlanıwshı ulıwma belgilerin úyreneyik.

Ideal kristallarda atomlar qatań dáwirlik jaylasqanlıǵı aqıbetinde kristall ishinde dáwirlik elektrlik maydan keltirilgen boladı. Kristallardıń dáwirlik ishki elektr maydanlarınıń hár qanday buzılıw nuqsanı boladı. Nuqsanlarǵa misal retinde basqa atom qospasınıń kristall atomı ornına jaylasıp alıwı hám kristall atomınıń ornınan ketiwi vakanciya (bos orın) payda bolıwın keltiriw mûmkin.

Eger kristalldaǵı nuqsanlar az bolsa, bul jaǵdayda olar bir-birinen bir az muǵdarda joqarıda jaylasqan, yaǵníy kristall pánjeresi nuqsanları ulıwmalasqan boladı. Bunda kristall ishindegi elektr maydanı tek ǵana nuqsan átirapında ǵana buzıladı, basqasha aytqanda kristalldıń dáwirli V potencialına nuqsan jaqıñında V' qosımsha potencial qosılaǵı, tolıq potencial $V=V+V'$ boladı.

Soniń ushın da tek usı tarawda bolǵan elektronlardıń energetik halatlari ózgeredi, bul bolsa ideal qattı dene elektronları energiya zonalarına qosımsha ulıwmalasqan energetikalıq halatlari

payda bolıwına alıp keledi. Bunday ulıwmalıq halatlar sanı N nuqsanlar sanına teń, yaki eger bir nuqsan bir neshe halatta bola alsa, ulıwmalıq halatlar sanı nuqsanlar sanınan úlken boladı.

Ulıwmalıq energetikalıq qáddiler hám dielektrikler elektronları qadaǵan etilgen energiyalar zonası bolǵan energetikalıq spektrge iye. Álbette bunday kristallarda ulıwmalıq energetikalıq halatlar ruxsat etilgen zonalarǵa túsiwi mümkin. Eger olar ótkiziwsheńlik zonasında jaylassa, olardı rezonans qáddileri, eger olar valent zonasında jaylassa, olar antiy rezonans qáddileri delinedi. Bul halatlardaǵı nuqsanlarǵa tiyisli elektronlar olar menen baylanısın joytadı hám ulıwmalasqan zona elektronları qatarına qosıladı.

Biraq kóp halatlarda nuqsanlar qáddilerde jaylasqan elektronlar nuqsanlarına baylanıslı qalıwı mümkin, olar tek jillılıq háreketi yaki basqa energiya deregi esabinan óz nuqsanların ajıratıp jiberiw-aktivlestiriw mümkin. Nuqsanlarǵa barlıq elektronlar elektr ótkiziwsheńlikte qatnasa almaydı. Bunday nuqsanlarǵa elektronlar ushın qáddiler ótkizgishtiń belgilenbegen zonasında jaylasqan boladı.

Ótkiziwsheńlik zonasına elektronlar bere alatuǵın nuqsanlardı danalar delinedi, quramında danalar bolǵan yarım ótkizgishlerde bolsa elektron ótkiziwsheńlikli yarım ótkizgishler yaki n-tür yarım ótkizgishler delinedi. Sáykes ráwıshe yarım ótkizgishlerdiń ótkiziwsheńlik zonasındaǵı elektronlar qosıw menen baylanıslı elektr ótkiziwsheńlik elektron ótkiziwsheńlik yaki n-tur ótkiziwsheńlik delinedi.

Eger kristalldı qızdırǵanda elektron valent zonadan nuqsanlar qáddilerine óte alsa, bul jaǵdayda valent zonada háreketsheń oń zaryadlı gewekler payda boladı, gewek elektr ótkiziwsheńlik payda boladı. Elektronlardı ózine qabil etiwshi nuqsanlar akceptorlar dep atalǵan, quramında akceptorlar bolǵan yarım ótkizgishti bolsa yaki gewek ótkiziwsheńlikli yarım ótkizgish yaki p-tur yarım ótkizgish delinedi.

Nuqsanlardı klasslarǵa ajıratıw kristall maydanniń kemis tárepinen buzılıwı ólshemlerge tiykarlangan:

- a) noqatlı nuqsanlar-olarǵa ólshemleri $x < a$, $y < a$, $z < a$ bolǵan nuqsanlar sıyaqlı, bunda a kristall pánjereniń turaqlısı;
- b) sıziqlı (bir ólshemli) nuqsanlar, eki baǵdardada olardıń ólshemleri kishi ($< a$) hám úshinshi baǵdarda ólshemi hár qansha bolıwı ($> a$) mümkin;
- c) tegis (eki ólshemli) nuqsanlar, olardıń bir baǵdarda ólshemi kishi;
- d) kólemlı (úsh ólshemli) nuqsanlar, olardıń bazıları makro nuqsanlarǵa baylanıslı boladı.

Bul ólshemler boyınsha klasslarǵa bir neshe birdey yaki hár qıylı ápiwayı nuqsanlardıń birikpesinen ibarat quramalı nuqsanlardı kiritiw mümkin.

Kóphsilik jaǵdaylarda valentligi menen ayrılatuǵın qosımta atomları vakansiyalardıń payda bolıwına alıp keledi. Bunday jaǵday KCl kristallarına Ca atomların kirgizgende orın aladi.

Bunday jaǵdayda kristal neytrallığın saqlaydı hám eki valentli kalciy atomı bir kaliy atomınıń orın almastırıdı, al kaliy atomı turatuǵın orın bos orıngá aylanadı.

Qattı denelerdegi diffuziyanı házirgi waqıtları «tamǵa salıngan» atomlar usılin paydalananı effektivli türde úyrenedi. Bunday izertlewlerde zatlardıń betine radioaktivli «tamǵa salıngan» atomlar «otırǵızıladı». Bunnan keyin alıngan úlgi berilgen temperaturada «tamaǵa salıngan» atomlardıń 0,3-1 mm tereńlikke ótetüǵınday waqt ishinde uslap turıladı. Bunnan keyin úlginiń aktivligi ólshenedi. Bul qatlam ısqılap tegislew joli menen joq etilgennen keyin aktivlik qaytadan

ólshenedi. Bunday operacyjalardı bir neshe ret qaytalaydı. Usınday jollar menen «tamǵa salıńǵan» atomlardıń ótiwiniń ortasha tereńligi hám berilgen temperaturadaǵı D diffuziya koefficientin esaplaydı. Hár qıylı temperaturalarda tájiriybeler seriyasın ótkeriw joli menen (12) formuladaǵı D0 menen Ea parametrlarınıń mánisleri aniqlanadı. (3) hám (4) formulalar jáne maǵlıwmatlar járdeminde hár qıylı temperaturalardaǵı atomlardıń kóshiw jiyiliklerin bahalaw múmkin. Misali alfa- temirde 1800 K temperaturada uglerod atomı 1 sekundta 1011 ret kóshedı.

Bólme temperaturasında bolsa onlaǵan sekundta 1 ret kóshedı. Solay etip diffuziya sezilerliktey orındı balqıw temperaturasına jaqın temperaturalarda iye bola aladı eken. Nikel yamasa xromniń bólme temperaturalarında temirde derlik ótpetyuǵınlıǵıñ belgili. Biraq 1000-1300 K temperaturalarda bul process ádewir tezlenedı.

Soniń ushın temirde islengen buymıldıń betine qozǵawshi nikel` yamasa xrom qatlamań joqarı temperaturalarda diffuziya járdeminde payda etedi eken. Yarım ótkizgishke hár qanday aralaspaları kirgiziw (legirovanie poluprovodnika, yarım ótkizgishti legiruy) ushın qısqa waqıtlar ishinde qızdırıwlar integrallıq sxemalardı alıw ushın qollanıladı: shańlandırıw joli menen yarım ótkizgishtiń betiniń belgili bir uchastkalarına túシリgen aralaspaları (legirlewshi aralaspaları) bir neshe júz gradusqa qızdırıw joli menen diffuziyalaydı hám onı legirleydi. Nátiyjede kristalda p hám n tipindegi yarım ótkizgishlerdiń quramalı oblastları payda boladı.

Nuqsanlardıń tígızlıǵı kem-kemnen kishireydi. Bul qubılıs túyinler arasında turǵan atomlardıń vakansiyalarga ótiwiniń (buni nuqsanlardıń rekombinaciyası dep ataydı) yamasa nuqsanlardıń kristalldıń betine yamasa kristaldaǵı dánesheler arasındaǵı shegaraga ótiwiniń saldarınan júzege keledi. Ayırım jaǵdaylarda noqatlıq nuqsanlar bolǵan qosımta toparlasadı hám jańa kristallıq faza oblastların payda etedi. Bul processlerdiń barlıǵı da nuqsanlardıń emleniwi dep ataladı.

Noqatlıq nuqsanlardıń elektr ótkizgishlikke tásiri. Eger zonalıq teoriya tiykarında esaplawlar ótkerilse haqıqıy kristallardıń elektr ótkizgishligi ideal kristall-dielektrikıń elektr ótkizgishliginen ádewir joqarı bolıp shıǵadı. Bul jaǵday tómendegidey eki sebepke baylanıshı:

Birinshiden donorlıq hám akceptorlıq qosımtalar dielektrikıń elektr ótkizgishligin joqarılataǵı (tap yarım ótkizgishlerdegi sıyaqlı).

Ekinshiden ionlıq kristallardaǵı vakansiyalardıń tusınan ionlardıń zaryadtı alıp júriwiniń jeńillewi menen baylanıshı. Eger 3 vakansiyada oń zaryadlanǵan ionniń turıwı kerek bolǵan bolsa hám ol E elektr maydanında jaylasqan bolsa, onda bul vakansiyaǵa oń zaryadlanǵan ionniń baǵıtında sekirip ótiwiniń itimallıǵı E ge qarama-qarsı baǵıttı sekirip ótiwiniń itimallıǵınan joqarı boladı. Oń zaryadlanǵan ionlar ortasha sırtqı elektr maydanınıń baǵıtında qozǵaladı hám elektr ótkizgishlikke tásır etedi. Tap sol sıyaqlı teris zaryadlanǵan ionǵa E baǵıtında qozǵalǵanǵa qaraǵanda E niń keri baǵıtında qozǵalǵan utımlıraq. Soniń ushın teris zaryadlanǵan ionlardıń bagıtına qarama-qarsı baǵıttı qozǵaladı hám elektr ótkizgishlikke óziniń úlesin qosadı.

Eki jaǵdayda da vakansiya kristall boyınsha orın almastırıp zaryadtıń kóshiwıń támiyinleydi. Biraq haqıyatında zaryadtı ionlar tasıdyı hám olar (oń hám teris zaryadlanǵan ionlar) vakansiyalardıń átirapında hár qıylı bolıp toparlasadı. Bunday jaǵdaylarda zaryadtı kóshiriwdıń vakansiyalıq mexanizmi haqqında gáp ketedi (biz tómende yarım ótkizgishlerdiń elektr ótkizgishliginiń geweklerdiń mexanizmi haqqında gáp etemiz). Bunday mexanizm boyınsha

zaryadlardı kóshiriw ushın ádewir kishi potenciallıq barerden ótiwdi talap etedi. Al elektronıdı ionnan ionǵa ótkeriw ushın úlken potenciallıq barerden ótiw kerek boladı.

Noqatlıq nuqsanlardıń kristallardıń reńine tásiri. Qosımta atomlar kristallardıń reńin ózgertedi. Mısalı almastırıw qosımtaları (primesi zamesheniya) bolǵan xrom ionları Al₂O₃ kristallarınıń qızıl reńin támiyinleydi (rubin kristallı alındı), al Al₂O₃ kristallarına kirkizilgen titan ionları olarǵa kók reń beredi (sapfir kristallı alındı).

Noqatlıq nuqsanlardı úyreniw usılları. Kólem birligindegi vakansiyalardıń sanın anıqlaw ushın ádette tómendegidey eki nátiye salıstırılıp kóriledi: birinshisi rentgenografiyalıq usıllardıń járdeminde alıngan pánjere parametriń dál mánisi, ekinshisi zattıń tígızlıǵın dál anıqlaw (kristalldıń massasınıń kólemine qatnasınıń shamasın dál anıqlaw).

Vakansiyalardıń kristallıq pánjereniń parametrin azmaz ǵana, biraq kristalldıń kólemin sezilerliktey ózgertetuǵınlıǵı belgili. Usınday jollar menen joqarı emes dállikte kristalldıń kólem birligindegi túyinler arasındaǵı atomlardıń sanın anıqlaw mümkin. Sebebi túyinler arasında jaylasqan atomlar zattıń tígızlıǵın ádewir úlkeytedi, al kristallıq pánjereniń parametriń shamasın az shamaǵa ózgertedi.

Eger kristallda vakansiyalar da, túyinler arasında jaylasqan atomlar da bar bolatuǵın bolsa, onda joqarıda bayanlangan usıldıń járdeminde kristalldıń kólem birligindegi vakansiyalar sanı menen túyinler arasındaǵı atomlar sanınıń ayırmasın bahalawǵa boladı. Al Frenkel boyınsha nuqsanlardıń tígızlıǵın qarap ótilgen usıldıń járdeminde anıqlaw mümkin emes.

Joqarıda qarap ótilgen elektr qarsılıǵı menen diffuziyanı ólshew, sonıń menen birge hár qıylı elektromagnit nurlarınıń jutılıw koefficientleriniń mánisin ólshew kristallardaǵı noqatlıq nuqsanlardı úyreniwe mümkinshilik beredi.

Qattı denelerde kólemlik nuqsanlar ólshemler bárshe úsh fazalıq baǵdarında pánjere dáwiri a dan úlken bolǵan nuqsanlar. Olar mánisi qattı dene dúzilisiniń makroskopik buzılıwlari bolıp tabıladı. Kólemlik nuqsanlarǵa yaki deneniń pútinin kólemin, yaki onıń ayrım bólimlerin iyelegen kólem >>a3 bolǵan elastikalıq kúshleniwlerge tiyisli. Makronuqsanlar mikronuqsanlardıń birlesisi nátiyjesinde payda bolıwı belgili. Biz aldın elastikalıq kúshleniwler dislikaciyalar payda bolıwinan derek ekenligin bildiredi. Makrokúshleniwler kristall pánjereniń atomlar aralıqtıń ózgeriwinen payda boladı.

Qattı denelerdi alıwda makrokúshleniwler payda bolıwına temperaturanıń dene kóleminde birdey bolmaslığı úlken úles qosadı. Bunday makrokúshleniwlerdi termoelastik kúshleniwler delinedi. Qattı denede onı tayarlaw yaki oğan termoislew beriwde temperaturanıń bólistiriliwi δT $\delta t = k \ c\rho\Delta T$. Bul jıllılıq ótkiziwsheńlik teńlemesi (k -salıstırmalı jıllılıq ótkiziwsheńlik koefficienti, c deneniń jıllılıq sıyımlılığı, ρ – tígızlıǵı).

REFERENCES

1. Киттель Ч. Введение физика твёрдого тела. Москва, «Физ. мат. гиз.», 1993г.
2. Жданов Г.С. Физика твёрдого тела. Москва, МГУ, 1988г.
3. Бушманов Б.Н. Хромов Ю.А. Физика твёрдого тела. Москва, «Высшая школа», 1971г.
4. К.Бектурганов, А.А. Блистанов, М.П.Шаскольская. Физика твёрдого тела. Т.13. С.1036. 1974г.

5. К.Бектурганов. Автореферат кандидатского дисс. МИСиС 1974г.
6. М.И.Абаев, Ю.Н.Толпаров. Физика твёрдого тела. Т.12. С.2492. 1970г.
7. А.А.Блистанов, А.Н.Павлов, М.П.Шаскольская. Физика твёрдого тела. Т.13. С.1901. 1971г.