

**ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS**  
**GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETAS**  
**FIZIKOS KATEDRA**

**SAULIUS JAZDAUSKAS**

**OŽĖ EFEKTAS KRISTALINIAME SILICYJE**

**Studijų programos „Fizika“  
MAGISTRO DARBAS**

**Mokslinis vadovas**  
**habil. dr. Arvydas Juozapas Janavičius**

**Šiauliai, 2007**

## Anotacija

Tiriamas Frenkelio defektų dinamiką Si kristale, kai neužpildyti gardelės mazgai (vakancijos) atsiranda dėl Ožė efekto, mes pritaikėme rentgenogramas. Švitinant susidaro vakancijos taip sukuriama Braggo atspindžiai

$$\frac{I_i}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2\langle u_i^2 \rangle (\sin \vartheta / \lambda)^2\right) \quad (1)$$

ir generuojamos gardelės osciliacijos (svyravimai). Įvertinus pradinis atomų vidutinius kvadratinus nuokrypius  $\langle u_i^2 \rangle$  kristalinėje gardelėje ir vidutinius kvadratinus nuokrypius, dėl vakancijų sukurtų panaudojus rentgenogramas, priklausomai nuo laiko  $\langle u(t)_v^2 \rangle$ , galime užrašyti, kad  $\langle u(t)^2 \rangle = \langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_v^2 \rangle$ . Įstačius  $\langle u(t)^2 \rangle$  vietoj  $\langle u_i^2 \rangle$  į (1) gaunama

$$\frac{I(t)}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2\left(\langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_v^2 \rangle\right) (\sin \vartheta / \lambda)^2\right) \quad (2)$$

Padalijus (2) iš (1) randamas atomų vidutinis kvadratinis nuokrypis priklausantis nuo laiko

$$\sqrt{\langle u(t)_v^2 \rangle} = \frac{\sqrt{\ln \frac{I_i}{I(t)}}}{\frac{4\pi \sin \vartheta}{\sqrt{3} \lambda}} \quad (3)$$

## Annotation

We applied soft X-rays for investigation of dynamics of Frenkel point defects in a Si crystal during the saturation with metastable vacancies generated by Auger effect. The irradiated vacancies cause the decreasing relative Bragg reflection

$$\frac{I_i}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2\langle u_i^2 \rangle (\sin \vartheta / \lambda)^2\right) \quad (1)$$

and generates lattice oscillations. Considering that initial mean square displacements of atoms  $\langle u_i^2 \rangle$  in the lattice and mean square displacements  $\langle u(t)_v^2 \rangle$  depends on the time like the result of vacancies generation by X-rays are independent terms we can write  $\langle u(t)^2 \rangle = \langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_v^2 \rangle$ . Substituting  $\langle u(t)^2 \rangle$  instead  $\langle u_i^2 \rangle$  into (1) we obtain

$$\frac{I(t)}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2\left(\langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_v^2 \rangle\right) (\sin \vartheta / \lambda)^2\right) \quad (2)$$

Dividing (2) on (1) we found dependence mean square displacements of atoms on time like result of irradiated vacancies and interstitials

$$\sqrt{\langle u(t)_v^2 \rangle} = \frac{\sqrt{\ln \frac{I_i}{I(t)}}}{\frac{4\pi \sin \vartheta}{\sqrt{3} \lambda}} \quad (3)$$

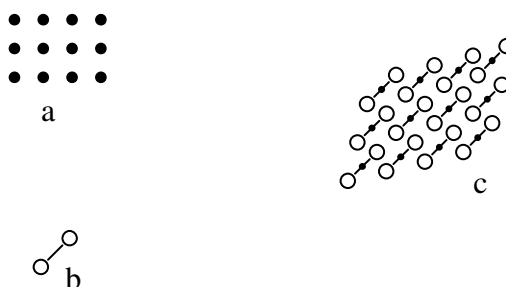
## Turinys

<b>Įvadas</b> .....	- 4 -
<b>Kristalų simetrija</b> .....	- 4 -
<b>Kristalų klasifikacija pagal cheminio ryšio tipą</b> .....	- 5 -
Kovalentiniai kristalai .....	- 6 -
<b>Krūvininkų rekombinacijos mechanizmai</b> .....	- 7 -
Tarpjuostinė rekombinacija .....	- 7 -
<b>Atomo elektrono būseną</b> .....	- 8 -
<b>Kristalo energijos juostos</b> .....	- 9 -
<b>Energijos juostų užpildymas elektronais. Laidininkai, puslaidininkiai ir dielektrikai</b> -	10 -
Visiškai užpildytų juostų atvejis .....	- 10 -
Iš dalies užpildytų energijos juostų atvejis .....	- 11 -
Puslaidininkiai .....	- 11 -
<b>Puslaidininkių savasis ir priemaišinis laidumas</b> .....	- 12 -
Skylinis laidumas .....	- 12 -
Savasis puslaidininkių laidumas .....	- 13 -
Priemaišinis puslaidininkių laidumas .....	- 14 -
<b>Rentgeno spinduliai</b> .....	- 16 -
<b>Fonono sąvoka</b> .....	- 20 -
<b>Radiaciniai defektai</b> .....	- 23 -
<b>Silicis</b> .....	- 23 -
Silicio atomo sandara .....	- 23 -
Fizikinės silicio savybės .....	- 25 -
<b>Liuminescencija</b> .....	- 25 -
<b>Ožė efektas</b> .....	- 27 -
<b>Spektro charakteristika</b> .....	- 27 -
<b>Ožė elektronų spektroskopija</b> .....	- 29 -
<b>Junginių relaksacijos procesų dinamikos kristalinėje Si gardelėje tyrimai švitinant</b>	
<b>Rentgeno spinduliais</b> .....	- 32 -
<b>Elektronų ryšio energija silicio atome</b> .....	- 35 -
<b>Išvados</b> .....	- 37 -
<b>Literatūra</b> .....	- 38 -

## *Ivadas*

Visi kūnai, kurie išlaiko patvarią formą, šnekamąja kalba vadinami kietaisiais. Tačiau fizikoje kietaisiais kūnais vadinami kristaliniai kūnai. Jų struktūrinės dalelės erdvėje pasiskirsčiusios tvarkingai pagal tam tikrą geometrinį dėsningumą, kur vadiname erdvine gardelė. Gardelė yra geometrinė sąvoka. Atitinkamu dėsningumu erdvėje nubrėžtų tiesių sankirtos taškai vadinami erdvinės gardelės mazgais. Taigi gardelė yra begalinis trimatis darinys. Kai erdvinės gardelės mazguose arba arti jų yra kūno struktūrinės dalelės, turime kristalą.

1 paveiksle, a, parodyta, kaip išsidėstę plokščios kvadratinės gardelės mazgai. Paprastų kristalinių struktūrų gardelės mazge yra vienas atomas, tačiau sudėtingesnėse struktūrose su gardelės



*1 pav.* Kristalinių gardelių struktūros

mazgu būna susieta atomų grupė. Toks atomas arba jų grupė vadinama kristalo gardelės baze. 1 paveiksle, b, parodyta iš dviejų atomų sudaryta kristalo gardelės bazė. Kristale visų tokių atomų grupių sandara ir orientacija yra identišką (1 pav., c).

Kristale struktūrinės dalelės (bazė) periodiškai kartojasi gana dideliu atstumu palyginti su atomo matmenimis. Tokį kūno struktūrinių dalelių išsidėstymą vadiname tolimąja tvarka.

Vienoda kristaline gardelė pasižymintis kristalinis individas vadinamas monokristalu. Jo išorinis pavidalas priklauso nuo vidinės struktūros ir kristalizacijos sąlygų. Galima išauginti ir taisyklingo daugiasienio pavidalo monokristalus. Tačiau dauguma kietųjų kūnų susideda iš daugybės labai mažų netvarkingai orientuotų kristalėlių, kurie dar vadinami kristalitais. Tokie kūnai vadinami polikristalais. Polikristalai yra techniškieji metalai, jų lydiniai, dauguma mineralų, keramika ir kt [6].

### ***Kristalų simetrija***

Kristalografija, tai mokslas, tiriantis kristalų ir kristalinės būsenos medžiagų sandarą, vidinę struktūrą. Savo ruožtu ji dar skirstoma į geometrinę ir struktūrinę kristalografiją.

Pirmoji tiria kristalų išorinės formos simetriją, kristalus grupuoja į klases, o pastarąsias į kristalų sistemas.

Antroji tiria kristalų vidinę struktūrą, nustato atomų ir kitų cheminių dalelių išsidėstymo geometriją.

Simetrijos nustatymui naudojamos šios hierarchinės priklausomybės (1 lentelė):

- 3 Simetrijos kategorijos;
- 7 Singonijos;
- 32 Simetrijos klasės;
- 230 Erdvės grupių.

1 lentelė

Kristalų simetrijų klasifikacija

Kategorija	Žemesnioji			Vidurinioji			Aukštesnioji
Singonija	Triklininė	Monoklininė	Rombinė	Tetragoninė	Trigoninė	Heksagoninė	Kubinė
Primityvi	L1			L4	L3	L6	4L33L2
Centrinė	C			L4PC	L3C = Li3	L6PC	4L33L23PC
Plokštuminė		P	L22P	L44P	L33P	L66P	3Li44L36P
Ašinė		L2	3L2	L44L2	L33L2	L66L2	3L44L36L2
Plokštuminė-ašinė		L2PC	3L23PC	L44L25PC	L33L23PC = Li33L23P	L66L27PC	3L44L36L29PC
Inversinė – primityvi					Li4	Li6	
Inversinė – plokštuminė					Li4 2L2 2P	Li6 3L2 3P	

### ***Kristalų klasifikacija pagal cheminio ryšio tipą***

Kristalą sudaro tarpusavyje sąveikaujančios struktūrinės dalelės: atomai, jonai, molekulės ir kt. Šių dalelių suardymo energija yra žymiai didesnė negu tarpusavio traukos energija. O pastaroji yra didesnė už dalelės vidutinę šiluminio judėjimo energiją – kitaip kristalas išsilydytų ar net sublimuotų.

Tarp kristalo struktūrinių dalelių vienu metu veikia traukos ir stūmos jėgos. Kristalo susidarymą sąlygoja traukos tipo sąveika. Ji gali būti įvairios prigimties: *joninė*, *van der Valso*, *kovalentinė* ir kitokia. Konkrečiame kristale ji gali būti ir mišri, t. y. arba iš karto veikia

kelios sąveikos rūšys, arba turi kelių sąveikų požymius. Pagal dominuojančią traukos sąveikos rūšį kristalai skirstomi į *joninius*, *kovalentinius*, *molekulinius*, *metališkuosius*, *vandeniliškuosius* (2 lentelė).

Jei kristalo visų nesąveikaujančių dalelių pilnutinė energija  $W$ , o sąveikaujančių  $W'$ , tai  $W' < W$ . Dydis  $\Delta W = W - W'$  vadinamas kristalo cheminio ryšio energija. Ryšio stiprumą nusako specifinė ryšio energija. Pastaroji apskaičiuojama arba vienam moliui ir išreiškiama  $J/mol$  vienetais, arba energija vienai molekulei. Tuomet jos matavimo vienetas dažniausiai yra  $eV/molekulei$  ( $1 eV/molekulei = 9,65 \cdot 10^4 J/mol$ ). Specifinė ryšio energija kinta maždaug nuo 0,1 iki 7  $eV/molekulei$ . Šio intervalo ribinės vertės nusako atitinkamai silpną ir stiprų cheminį ryšį. Kai specifinė cheminio ryšio energija yra 1  $eV/molekulei$  eilės, jį laikome vidutinio stiprumo.

2 lentelė

Kristalų klasifikacija

Kristalo tipas	Pavyzdys	Ryšio energija (J/mol)	Šio tipo kristalo savybių charakteristika
Joninis	NaCl LiF	180 240	Žemose temperatūrose mažas elektrinis laidumas, aukštose temperatūrose didelis joninis laidumas, selektyvi infraraudonojo spinduliavimo absorbcija
Kovalentinis	Deimantas SiC	170 283	Didelis kietumas, gryną kristalų žemose temperatūrose mažas elektrinis laidumas
Metališkasis	Na Fe	26 94	Didelis elektrinis laidumas, didelis kalumas
Molekulinis	Ar CH <sub>4</sub>	1,8 2,4	Žema lydymosi ir virimo temperatūra, didelis spūdimas
Vandeniliškasis	H <sub>2</sub> O (ledas) HF	1,2 7	Pasižymi polinkiu polimerizacijai

### *Kovalentiniai kristalai*

Gamtoje yra ir tokių kristalų, kurių struktūrinės dalelės yra vienodi atomai, o cheminio ryšio energija, kaip ir joninių kristalų, yra didelė (pvz., Si, Ge, anglies modifikacija – deimantas ir kt.). Dėl aukščiau aptartų priežasčių juose atomų sąveika negali būti joninė (vienodi atomai). Šiuose kristaluose atomus sieja kvantmechanis ryšys, vadinamas *valentiniu* arba *kovalentiniu* [6].

## ***Krūvininkų rekombinacijos mechanizmai***

Puslaidininkio laisvųjų krūvininkų rekombinacija, kai elektronas iš laidumo juostos peršoka tiesiog į valentinę juostą, vadinama *tarpuostine*.

### *Tarpuostinė rekombinacija*

Elektronui peršokant iš laidumo juostos į valentinę, jo energija sumažėja dydžiu  $\Delta W \geq \Delta W_g$ . Pagal energijos virsmus tarpuostinė rekombinacija skirstoma į 3 grupes: *spinduliuojančioji*, *nespinduliuojančioji* ir *Ožė* rekombinacija.

1. *Spinduliuojančiosios rekombinacijos* atveju sukuriama energijos  $h\nu = \Delta W$  fotonas. Šitoks švytėjimas vadinamas *rekombinaciniu*. Laisvojo elektrono gyvavimo trukmė laidumo juostoje labai priklauso nuo draustinės juostos pločio. Tačiau kai veikia dar ir kiti rekombinacijos mechanizmai, tai plačiajuosčiuose puslaidininkiuose krūvininkų vidutinė gyvavimo trukmė gali būti daug mažesnė.

2. *Nespinduliuojančiosios rekombinacijos* atveju elektronas perteklinę energiją perduoda kristalo struktūrinėms dalelėms, t. y. sukuria fononus. Puslaidininkų draustinės juostos plotis yra 1 eV eilės, o maksimali vieno fonono energija yra 0,1 eV eilės, todėl vieno rekombinacijos akto metu turėtų susidaryti apie 10 fononų. Kadangi daugiafononio proceso tikimybė yra labai maža, tai plačiajuosčiuose puslaidininkiuose šis rekombinacijos procesas nėra vyraujantis.

3. *Ožė rekombinacija*. Ji gali vykti  $n$  puslaidininkiuose, kai laisvųjų elektronų koncentracija yra didelė. Tuomet laidumo juostos elektronas, energijos perteklių atidavęs kitam laidumo juostos elektronui, pats rekombinuoja su skylė valentinėje juostoje. Šitokia krūvininkų rekombinacija vadinama *Ožė rekombinacija*. Energiją sugėręs elektronas peršoka į aukštesnį lygmenį laidumo juostoje. Dėl to jo būseną nėra stabili: jis spinduliuodamas šviesą arba ir nespinduliuodamas pereina į mažesnės energijos lygmenį [6].

## Atomo elektrono būseną

Atomo elektrono būseną pilnai aprašoma 4 kvantiniais skaičiais (3 lentelė):

3 lentelė  
Atomo elektrono būsenos

Pagrindiniu	$N(n = 1, 2, 3, \dots, \infty)$
Orbitiniu	$L(l = 0, 1, 2, \dots, n-1)$
Magnetiniu	$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$
Sukinio magnetiniu	$m_s(m_s = \pm 1/2)$

Pagal Paulio principą viename atome negali būti dviejų ar daugiau elektronų, kurių keturių kvantinių skaičių rinkiniai būtų vienodi, t.y.

$$Z(n, l, m, m_s) = 0 \text{ arba } 1; \quad (1)$$

čia  $Z$  - elektronų skaičius būsenoje, apibūdinamoje kvantiniais skaičiais  $n, l, m$  ir  $m_s$ .

Nejonizuoto atomo elektronų skaičius yra lygus jo eilės numeriui periodinėje elementų lentelėje. Jų pasiskirstymas atome pagrįstas Paulio principu ir mažiausios energijos principu, kuris teigia, kad nesužadintame atome elektronai pasiskirsto taip, kad atomo energija būtų mažiausia. *Atomo būsenos energija labiausiai priklauso nuo dydžio  $n$ , mažiau nuo  $l$  ir dar mažiau nuo  $m$  ir  $m_s$ .* Didėjant elektronų skaičiui, orbitinio kvantinio skaičiaus  $l$  įtaka energijos vertei didėja.

Būsenoje  $n$  gali būti ne daugiau kaip  $2n^2$  elektronų  $\left( \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2 \right)$ . Elektronai su tuo pačiu pagrindiniu kvantiniu skaičiumi sudaro elektronų sluoksnį.

To paties sluoksnio elektronai, kurių vienodas šalutinis kvantinis skaičius  $l$  sudaro jų posluoksnį. Posluoksnyje gali būti  $2(2l+1)$  elektronas. 4 lentelėje sužymėti sluoksniai, juos sudarantys posluoksniai, jų simboliai bei juose galimas didžiausias elektronų skaičius.

4 lentelė  
Elektronų sluoksniai ir posluoksniai

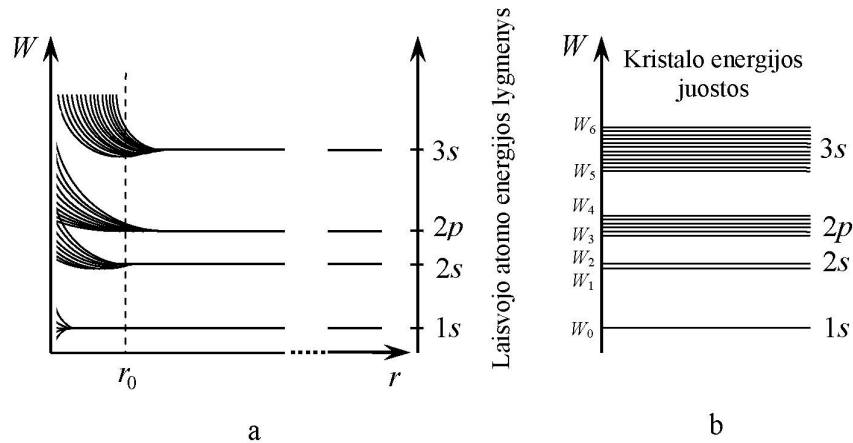
$N$	1	2	3	4	5										
Sluoksnio simbolis	K	L	M	N	O										
Didžiausias elektronų skaičius sluoksnyje	2	8	18	32	50										
$L$	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4
Posluoksnio simbolis	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g
Didžiausias elektronų skaičius posluoksnyje	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18



## Kristalo energijos juostos

Energijų vertes, kurias gali turėti kristalo elektronai, galima rasti naudojant ir *silpnojo*, ir *stipriojo* ryšio artinius. Čia aptarsime antrąjį artinį.

Jei atomai yra toli vienas nuo kito (atstumas tarp jų  $r \rightarrow \infty$ ) ir tarpusavyje nesąveikauja, tai jų energijos  $W$  spektras yra vienodų energijų lygmenų sistema (2 pav., a).



2 pav. Kristalo energijos juostos ir lygmenys

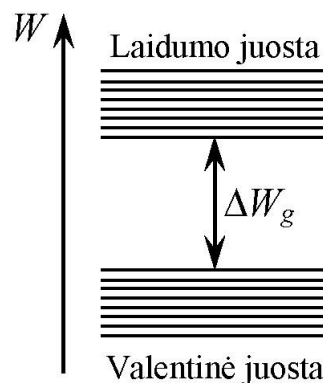
Kiekvienas lygmuo nusakomas dviem kvantiniais skaičiais: pagrindiniu  $n$  bei orbitiniu  $l$  ir yra išsigimęs  $(2l + 1)$  kartų. Atomus suartinant ir taip sudarant kristalą, elektrono energija pradeda priklausyti nuo joninio kamieno sukurto elektrinio lauko. Elektrono ir šio lauko sąveika išsigimimą panaikina, todėl kiekvienas  $W_{n,l}$  suskyla į  $(2l + 1)N$  lygmenų (čia  $N$  - atomų skaičius kristale). Atstumai tarp gretimų suskilusių lygmenų priklauso nuo tarpatominio atstumo  $r$ , nes nuo  $r$  vertės priklauso sąveikos stiprumas. Ši priklausomybė parodyta 2 pav., a. Pusiausvirame kristale nusistovi tam tikras atstumas  $r_0$  tarp atomų, todėl energijos lygmenys yra susigrupavę į šiam atstumui atitinkančias juostas (2 pav., b). Kaip matyti 2, b paveiksle, kristalo galimų energijų intervalai  $W_1 \div W_2$ ,  $W_3 \div W_4$ ,  $W_5 \div W_6$  atskirti draustinių energijų intervalais  $W_0 \div W_1$ ,  $W_2 \div W_3$  ir  $W_4 \div W_5$ . Kietojo kūno fizikoje jie atitinkamai vadinami *leistinėmis* ir *draustinėmis energijos juostomis*. Šių juostų plotis  $\Delta W$  nepriklauso nuo kristalo matmenų, o priklauso nuo jų sudarančių atomų kilmės ir kristalo struktūros. Juostų plotis dar priklauso nuo krypties kristale, nes atstumai tarp atomų skirtingomis kryptimis yra skirtingi. Atskirais atvejais dvi leistinės juostos *gali persikloti* viena su kita, sudarydamos *hibridinę* juostą.

Įvertinkime valentinių ir vidinių sluoksnių elektronų energijų juostų plotį. Valentiniai elektronai įveikę potencialinius barjerus, gali pereiti nuo vieno atomo prie kito tuneliniu būdu. Tunelinio perėjimo tikimybė valentiniams elektronams didelė, o vidinių sluoksnių elektronams - labai maža. Todėl valentiniai elektronai nėra lokalizuoti atome, bet migruoja kristale. Perėjimo greitis apytiksliai lygus jų greičiui atome ( $v \sim 10^5$  m/s), todėl valentiniai

elektronai mazge užtrunka laiką  $t = (d/v) \approx (10^{-10} \text{ m} / 10^5 \text{ m/s}) = 10^{-15} \text{ s}$  ( $d$  - atomo matmenys). Jų energija yra neapibrėžta dydžiu  $\Delta W$ , kuris ir nusako elektronų energijos lygmens plotį arba lygmens išplitimą. Jį randame iš Heizenbergo principo:  $\Delta W = \hbar/t \sim 1 \text{ eV}$ . Matome, kad elektronų kristale energijos lygmenys išsiplečia ir sudaro energijos juostas. Valentinių elektronų (pvz.,  $3s$ ,  $2 \text{ pav.}$ , b) leistinių juostų plotis gali siekti keletą elektronvoltų. Si vidinių elektronų (pvz.,  $1s$ ,  $2s$ ) lygmenys beveik neišplinta: elektronai sužadintame būvyje užtrunka laiką  $t \sim 10^{-8} \text{ s}$ , iš čia  $\Delta W = \hbar/t \sim 10^{-7} \text{ eV}$ . Ši energija ženkliai mažesnė už atstumą tarp leistinių energijų lygmenų, kuris yra  $\sim 1 \text{ eV}$  [5].

### ***Energijos juostų užpildymas elektronais. Laidininkai, puslaidininkiai ir dielektrikai***

Kristalo energijos juostoms vaizduoti paprastai naudojama supaprastinta schema (3 pav.). Šioje scheme vaizduojamos tik dvi juostos iš visų galimų energijos juostų: *valentinė* (atitinkanti nesužadintų valentinių elektronų būvius) ir artimiausia jais sužadintų energijų juosta.



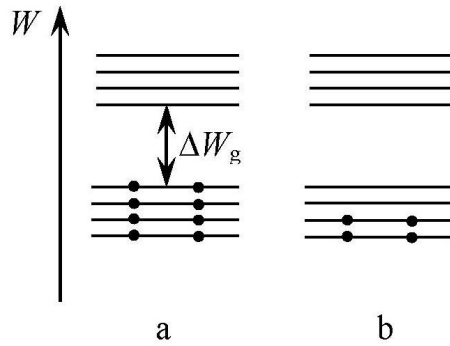
3 pav. Kristalo juostų vaizdavimo schema

Ši juosta dar vadinama *laidumo* juosta, nes nesant išorinių poveikių joje elektronų nėra: tik gavę energijos, elektronai pereina į šią juostą ir gali dalyvauti elektriniame laidume. Abi juostos atskirtos pločio  $\Delta W_g$  draustine juosta [5].

Laisvųjų elektronų savybės užpildytoje ir neužpildytoje valentinėje juostoje skiriasi.

### ***Visiškai užpildytų juostų atvejis***

Elektrinis laukas gali pakeisti judėjimą tik tų elektronų, kurie randasi nepilnai užpildytoje juostoje. Išorinio elektrinio lauko veikiamas elektronas laisvojo kelio nuotolyje įgyja  $10^{-8} - 10^{-4} \text{ eV}$  energiją. Jos pakanka jį perkelti į tos pačios juostos didesnės energijos lygmenis ir nepakanka elektronus perkelti į laidumo juostą.



4 pav. Kristalo energijos juostos

Tokie perėjimai galimi tik tuo atveju, jei valentinėje juostoje yra laisvų energijos lygmenų, t.y. ši juosta nėra elektronų visiškai užpildyta. Tačiau esant visiems valentinės juostos energijos lygmenims užimtiems (4 pav., a) ir jei ji atskirta nuo laidumo juostos pakankamai plačia draustine juosta, elektronai elektriniame laidume nedalyvauja. Išorinis elektrinis laukas šiose medžiagose srovės nesukuria, o jos vadinamos dielektrikais (technikoje – izoliatoriais).

#### *Iš dalies užpildytų energijos juostų atvejis*

Tokioje juostoje yra didelis skaičius laisvų lygmenų (4 pav., b), kurių energijos nežymiai skiriasi nuo elektronais užimtų lygmenų. Todėl elektrinis laukas gali elektronus perkelti į gretimus laisvus lygmenis. Taip medžiagoje bus sukurta srovė. Šios medžiagos, kuriose valentinė juosta yra iš dalies užpildyta elektronais, vadinamos laidininkais. Tipiniais laidininkais yra metalai.

#### *Puslaidininkiai*

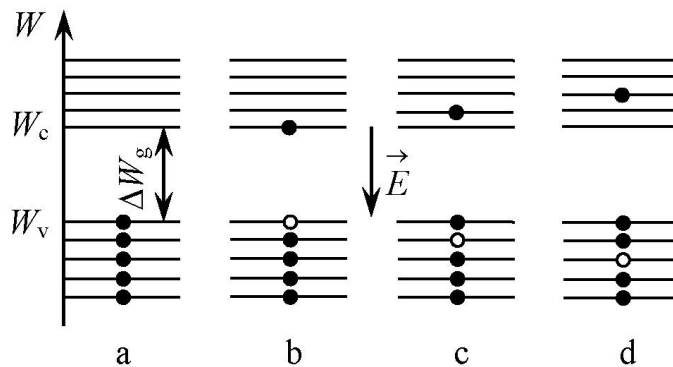
Jei laidumo juostą nuo visiškai užimtos valentinės skiria nedidelio pločio draustinė juosta ( $\Delta W_g < 2 \div 3 \text{ eV}$ ), tai temperatūroje  $T > 0K$  dalis elektronų iš valentinės pereina į laidumo juostą. Abi juostos tampa dalinai užpildytos laisvais krūvininkais, o medžiaga laidu srovei. Šios medžiagos vadinamos puslaidininkiais.

Taigi, medžiagų suskirstymą į dielektrikus, puslaidininkius ir laidininkus kietųjų kūnų juostinis modelis aiškina valentinės juostos užpildymu elektronais. Jei valentinė juosta užimta ir draustinės juostos plotis  $\Delta W_g \geq 3 \text{ eV}$ , turime dielektriką, o jei  $\Delta W_g \leq 3 \text{ eV}$  - puslaidininkį. Kuomet valentinė juosta yra dalinai užpildyta elektronais arba ji ir laidumo juostos persidengia, turime laidininką.

## Puslaidininkių savasis ir priemaišinis laidumas

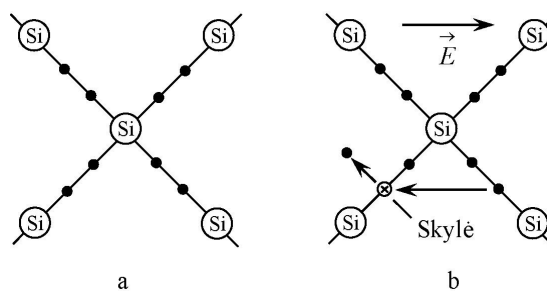
### Skylinis laidumas

Tarkime, kad užimtos valentinės juostos elektronas (5 pav., a), gavęs šiluminio judėjimo energiją  $W \geq W_g$ , pereina į laidumo juostą. Tuomet valentinėje juostoje susidaro neužimtas energijos lygmuo. Šitokią kvantinę būseną kristale vadina skylė. 5 paveiksle skylė vaizduojama baltu skrituliuku, elektronai - tamsiu. Skylės susidarymas elektriškai ekvivalentus elementaraus teigiamo krūvio atsiradimui, todėl skylėi priskiriamas elementarusis dydžio  $e$  krūvis.



5 pav. Skylinis laidumas

Atsiradusią skylę gali užimti bet kuris valentinės juostos elektronas. Kaip matyti paveiksle, dėl to, pavyzdžiui elektronui valentinėje juostoje kylant aukštyn, skylė atitinkamai leidžiasi žemyn. Šitoks skylių judėjimas valentinėje juostoje vadinamas skyliniu laidumu. Peršokę į laidumo juostą elektronai taip pat dalyvauja elektriniame laidume. Šios juostos sąlygojamas laidumas vadinamas elektroniniu. Taigi puslaidininkiuose turėsime dviejų tipų krūvininkus: elektronus ir skylės. Panagrinėkime dar ir kitą laidumo aiškinimą. Tam paaškinsime kristalo, sudaryto iš silicio (Si) ar germanio (Ge) elektrinį laidumą. Šie kristalai yra tipiniai puslaidininkiai, su jais susiję dauguma mikroelektronikos laimėjimų. Si atomo išorinio sluoksnio elektronų konfigūracija yra  $3s^23p^2$ , o Ge -  $4s^24p^2$ . Taigi jų, panašiai kaip ir anglies atomo, išoriniame sluoksnyje yra 4 valentiniai elektronai. Todėl Si ir Ge kristale tarp atomų, panašiai kaip deimanto kristale, yra kovalentinis ryšys. Kiekvienas Si ar Ge atomas turi keturis vienodu nuotoliu nutolusius artimiausius kaimynus (6 pav., a).



6 pav. Silicio atominis modelis

Jei kristalo temperatūra  $T > 0K$ , tai jo atomai chaotiškai virpa. Jų virpėjimo vidutinė energija proporcinga  $kT$ . Kambario temperatūroje tai sudaro apie  $2,5 \cdot 10^{-2} eV$ . Šios energijos nepakanka elektronams ryšius nutraukti. Tačiau elektronai pagal energijas pasiskirsto statistiškai, todėl visuomet bus tokių elektronų, kurių šiluminės judėjimo energijos viršys ryšio energiją. Tokie elektronai nutraukia tarpatominius ryšius, o kristale atsiranda laisvieji elektronai ir skylės. Sukūrus puslaidininkyje dydžio  $\vec{E}$  elektrinį lauką elektronai (6 pav., b tamsūs skrituliukai) judės prieš lauko kryptį, o skylės - pagal lauką. Skylių judėjimą aiškiname šitaip. Tarkime, kad į skylę peršoka gretimojo atomo (6 pav. b, - dešiniojo) elektronas. Tuomet buvusi skylė pasinaikins, o dešinėje, t.y. pagal lauko kryptį atsiranda nauja. Tokį skylės atsiradimą gretimame mazge ir vadina jos judėjimu. Akivaizdu, kad skylės sklaidimo kryptis priešinga minėto elektrono judėjimo krypčiai.

### Savasis puslaidininkių laidumas

Elektronų ir skylių judėjimas gryname puslaidininkyje (t.y. be priemaišų) sudaro savąjį puslaidininkio laidumą, o toks puslaidininkis vadinamas tikruoju. Svarbiausias puslaidininkius apibūdinantis dydis yra draustinės juostos plotis  $\Delta W_g$ , kuris nurodytas 5 lentelėje.

5 lentelė  
Elementų draustinės juostos plotis

Elementai	Draustinės juostos plotis $\Delta W_g$ (eV)
Silicis (Si)	1.11
Germanis (Ge)	0.67

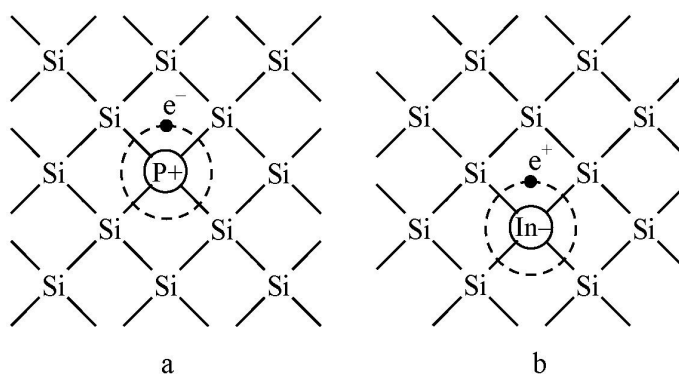
Puslaidininkių laidumas priklauso nuo  $\Delta W_g$  dydžio bei temperatūros. Kuo mažesnis draustinės juostos plotis ir kuo aukštesnė kristalo temperatūra, tuo didesnis skaičius elektronų ir skylių susidaro ir tuo būdu didesnis bus puslaidininkio elektrinis laidumas. Priešingai,

mažėjant temperatūrai, elektronų ir skylių skaičius mažėja, o esant  $T = 0K$  puslaidininkis virsta dielektriku.

Kambario temperatūroje ( $T \sim 300K$ ) puslaidininkių savasis laidumas yra nedidelis. Jį ženkliai galima padidinti įvedus į puslaidininkį priemaišas [5].

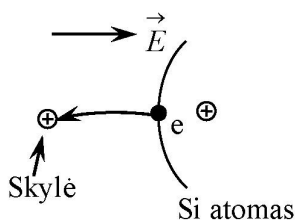
### Priemaišinis puslaidininkių laidumas

Reali kristalų gardelė turi defektų ir priemaišų, kurie iš esmės keičia jo elektrines optines ir kitas fizikines savybes. Pvz., tik 0.001 procento siekianti boro koncentracija silicyje jo laidumą kambario temperatūroje padidina tūkstantį kartų. Priemaišų įtaką elektriniam laidumui aiškiname šitaip.



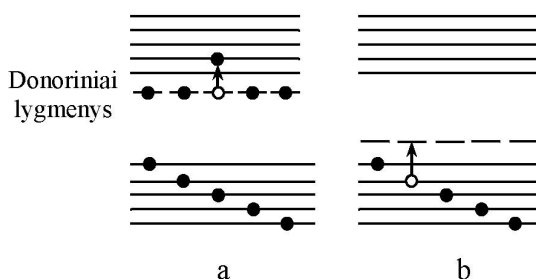
7 pav. Silicio kristalinės gardelės modelis

Tarkime, kad gardelės mazge esantį keturvalentį Si atomą (7 pav., a) pakeitė penkiavalentinės priemaišos atomas (fosforo, arseno, stibio ir kt.). Keturi priemaišos elektronai sudaro kovalentinius ryšius su keturiais gretimais Si atomais, o penktasis (pažymėtas simboliu  $e^-$ ) - tampa laisvu, o priemaišos atomas - teigiamu jonu. Pats jonas nėra srovės nešėjas, nes yra lokalizuotas gardelės mazge. Atsiradę laisvieji elektronai žymiai padidina kristalo laidumą, lyginant su savuoju laidumu. Tokios priemaišos, kurių atomai didina laisvųjų elektronų skaičių, vadinamos donorais. Jos yra laisvųjų elektronų gardelei tiekėjais. Tokiuose puslaidininkiuose vyrauja elektroninis laidumas, o savasis skylinis - nežymus. Jie vadinami  $n$  - puslaidininkiais (negative - neigiamas).



8 pav. Elektroninio šuolio scheminis vaizdavimas

Kitaip bus, jei silicio atomą pakeisime trivalentine priemaiša, pavyzdžiui, indžiu (In), boru (B). Priemaišos atomui ryšiui sudaryti trūksta vieno elektrono, kurį priemaiša gali pasiimti iš gretimo silicio atomo. Priemaiša tampa neigiamu jonu, o silicio atomas - teigiama skylė  $e^+$  (7 pav., b). Į susidariusią skylę gali peršokti elektronas iš gretimo Si atomo, tuomet skylė atsiras pastarajame (8 pav.).



9 pav. Kristalo energijos lygmenys

Ryšį nutraukę elektronai juda prieš lauką  $\vec{E}$ , skylės - pagal lauką. Skylės kuriančios priemaišos vadinamos akceptoriais, o medžiaga - p-puslaidininkiu (positiv - teigiamas). Medžiagų laidumas esant priemaišoms vadinamas priemaišiniu, kuris priklauso nuo jų koncentracijos ir gali žymiai viršyti savąjį laidumą.

Juostinės teorijos požiūriu priemaišų atomai sukuria lokalinius energijos lygmenis. Donorinių priemaišų lokaliniai lygmenys yra išsidėstę arti laidumo juostos (9 pav., a), akceptorinių – arti valentinės juostos (9 pav., b). Juose esantys elektronai negali judėti kristale.

Elektronai iš užimtų lokalinių donorinių energijos lygmenų gali pereiti į laidumo juostą. Tam reikia mažiau energijos, negu pereiti elektronui iš valentinės į laidumo juostą. Panašiai į neužimtus lokalinius akceptorinius lygmenis elektronai gali pereiti iš valentinės juostos. Tam taip pat reikia nedaug energijos.

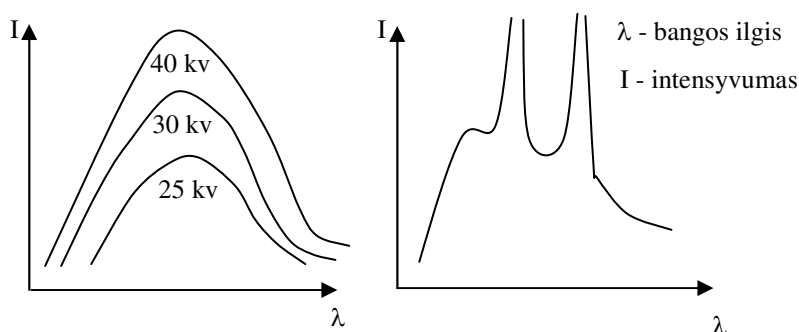
Arti laidumo arba valentinės juostų esantys energijos lygmenys vadinami sekliaisiais. Tačiau priemaišiniai lygmenys gali susidaryti ir arti draustinės juostos vidurio. Pastarieji vadinami giliaisiais lygmenimis, arba gaudyklėmis. Jie įtakoja ne laisvųjų krūvininkų tankį, o jų judrumą. Šiuose lygmenyse elektronai gali išbūti gana ilgą laiką, kas mažina puslaidininkų elektrinį laidumą.

Jeigu priemaišų koncentracija yra labai didelė ir jos tarpusavyje sąveikauja, tuomet lokaliniai lygmenys išplinta į juostas. Jos gali persidengti su kristalo galimų energijų juostomis.

## ***Rentgeno spinduliai***

1895 m. V. Rentgenas atrado spindulius, kurių bangos ilgis trumpesnis už ultravioletinių. Jie vėliau buvo pavadinti Rentgeno spinduliais. Už šio spinduliavimo atradimą 1901m. V. Rentgenas apdovanotas Nobelio premija. Jis buvo pirmasis Nobelio premijos laureatas.

Rentgeno spinduliai yra elektromagnetinės prigimties kaip ir radijo bangos, šviesos spinduliai ir  $\gamma$  - spinduliai (10 pav.). Rentgeno spindulių bangų ilgiai apima platų intervalą –



10 pav. Rentgeno spindulių bangų ilgiai

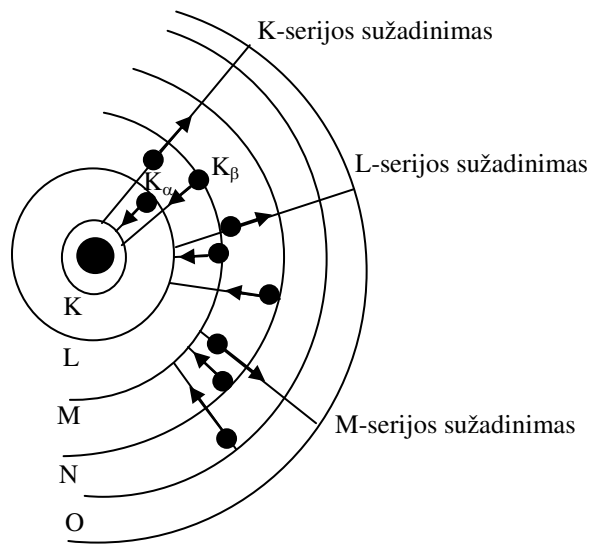
nuo kelių šimtų angstromų iki šimto tūkstantųjų angstromo dalių. Pačios ilgiausios rentgeno spindulių bangos persidengia su šviesos spindulių ultravioletine sritimi. Priklausomai nuo įelektrintų dalelių (elektronų, protonų) arba fotonų sąveikos su medžiagos atomais susidaro ištisinis arba charakteristinis rentgeno spindulių spektras.

Ištisinis spektras sudarytas iš įvairaus ilgio elektromagnetinių bangų, jo charakteris priklauso nuo įtampos paduotos į rentgeno lempą ir nepriklauso nuo anodo medžiagos. Ištisinio spektro gavimui patogiau naudoti rentgeno lempas su sunkiais anodais. Dažniausiai naudojamas volframo anodas.

Ištisinis spektras gaunamas tik iki tam tikros įtampos. Toliau keliant įtampą spektro charakteris keičiasi, gaunamas charakteristinio spektro linijos prie griežtai apibrėžtų bangos ilgių. Charakteristinis spektras sudarytas iš kelių serijų linijų. Sunkiems elementams gaunamos 5 serijos tokių linijų: K, L, M, N, O. Kiekvienai serijai sužadinti reikalinga skirtinga įtampa. K serijos sužadavimo įtampa didesnė už L serijos sužadavimo įtampą. K serija sudaryta iš mažo bangos ilgio spindulių, t.y. keičiasi spinduliai. Atskiros serijos bangos žymimos graikiškomis raidėmis ( $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$ ).

Jeigu sužadavimo metu elektronas išmušamas iš valentinio sluoksnio, tuomet susidaro šviesos spinduliai. Jeigu išmušamas vienas elektronas iš vidinių atomo sluoksnių, tai po to sekantys labiau nutolusių elektronų peršokimai iššaukia charakteristinį rentgeno spinduliavimą.



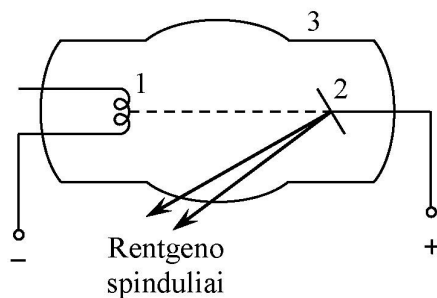


11 pav. Atomo modelis

Rentgeno lemposje elektros srovės energija pernešama pagreitiniais elektronais ir transformuojama į elektromagnetinio spinduliavimo energiją.

Rentgeno spindulių bangos ilgis  $\lambda = 10^{-14} \div 10^{-7}$ . Trumpieji Rentgeno spinduliai ( $\lambda < 0.2\text{nm}$ ) yra labai skvarbūs, ir todėl jie vadinami kietaisiais, o ilgieji - mažiau skvarbūs ir vadinami minkštaisiais spinduliais. Yra dirbtiniai ir gamtiniai Rentgeno spindulių šaltiniai. Gamtiniai – tai radioaktyvieji izotopai, Saulė ir kai kurie kiti kosminiai kūnai.

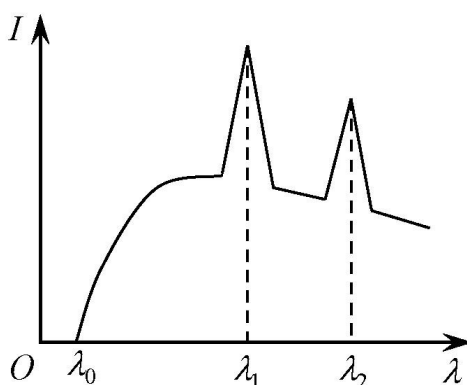
*Dirbtiniuose šaltiniuose Rentgeno spinduliai susidaro stabdant greitas elektringąsias daleles, dažniausiai elektronus.* Taip Rentgeno spinduliai susidaro Rentgeno vamzdžiuose, kineskopuose, elektroniniuose vamzdžiuose, netgi elektroninėse lempose ir kt.



12 pav. Rentgeno vamzdis

Rentgeno vamzdis yra elektrovakuuminis prietaisas (12 pav.). Jo pagrindinės dalys - katodas 1 (elektronų šaltinis) bei anodas 2, kuris dar vadinamas antikatomu (Rentgeno spindulių šaltinis) ir sandarus balionas 3 (stiklinis arba stiklo ir metalo). Anodas gaminamas iš sunkiųjų metalų. Elektronus greitina tarp katodo ir anodo sudaryta aukšta įtampa  $U$ . Ji būna nuo kelių dešimčių  $kV$  iki milijonų voltų. Greitieji elektronai, susidūrę su anodu, stabdomi.

Didžioji elektronų energijos dalis virsta šiluma ir tik maža dalis ( $\sim 0.1 \div 5\%$ ) - Rentgeno spinduliai. Šitaip gautasis Rentgeno spinduliavimas vadinamas stabdomuoju. Šie virsmai yra atsitiktiniai, t.y. įvairių elektronų energijos skirtinga dalis virsta Rentgeno spinduliavimu. Dėl to stabdomojo Rentgeno spinduliavimo spektras yra ištisinis. Tačiau jis trumpųjų bangų srityje turi nuo antikatodo medžiagos nepriklausančią ribą, t.y. minimalų bangos ilgį  $\lambda_0$  (13 pav.).



13 pav. Rentgeno spinduliuojamo spektro bangos ilgis

Eksperimentiškai nustatyta, kad  $\lambda_0$  su greitinančiąja įtampa  $U$  susijusi šitokia lygybė:

$$\lambda_0 = \frac{12390}{U}; \quad (2)$$

čia bangos ilgis matuojamas angstromais ( $1\text{\AA} = 10^{-10}m$ ), o įtampa - voltais. Šią priklausomybę paaiškino kvantinė teorija. Stabdant elektroną susidariusio Rentgeno spindulių kvanto energija  $\varepsilon = h\nu$  negali būti didesnė už elektrono energiją  $eU$ , įgytą elektriniame lauke. Kvanto didžiausiai energijai galioja lygybė

$$eU = h\nu_0; \quad (3)$$

Šioje lygybėje išreiškę dažnį bangos ilgiu, gauname:

$$\lambda_0 = \frac{c}{\nu_0} = \frac{hc}{eU}; \quad (4)$$

Taigi šio spektro trumpabangės ribos bangos ilgis  $\lambda_0$  yra atvirkščiai proporcingas elektronų greitinančiai įtampai. Pavyzdžiui, elektroninėse lempose ( $U \sim 10V$ ) stabdomojo Rentgeno spektro trumpabangė riba  $\lambda \sim 10^2\text{\AA}$ . Tai minkštieji Rentgeno spinduliai ir juos stiklinis ar metalinis balionas visiškai sugeria. Televizorių kineskopuose greitinančioji įtampa  $U \sim 10^4$  eilės, todėl  $\lambda \sim 1\text{\AA}$ . Todėl apsaugai nuo spinduliavimo naudojamos pakankamo storio kineskopo vamzdžio sienelės.

Iš bandymo nustačius  $\lambda_0$  ir  $U$ , pagal (4) formulę apskaičiuojama Planko konstanta. Tai vienas tiksliausių jos nustatymo būdų.

Jeigu elektronus greitinanti įtampa viršija tam tikrą anodo medžiagai būdingą vertę, tuomet Rentgeno spindulių spektras būna sudarytas iš dviejų dalių: be stabdomojo spinduliavimo stebimas monochromatinis spinduliavimas. Jis būdingas elektronus stabdančiai medžiagai, todėl vadinamas būdinguoju spinduliavimu. Jo intensyvumo  $I$  priklausomybė nuo bangos ilgio parodyta 13 paveiksle. Čia būdingąjį spinduliavimą atitinka bangų ilgio  $\lambda_1$  ir  $\lambda_2$  taškuose atsiradę intensyvumo šuoliai. Eksperimentiškai nustatyta, kad būdingojo spinduliavimo spektro linijos susitelkusios į serijas. Jos vadinamos K, L, M, N ir t.t. serijomis. Kiekviena serija sudaryta iš keleto linijų. Jos žymimos indeksais  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  ( $K_\alpha, K_\beta, K_\gamma, \dots, L_\alpha, L_\beta, L_\gamma, \dots$  ir t.t.) atitinkamai didėjančiam dažniui. Šių serijų susidarymas paaiškinamas šitaip. Atomą apšaudant didelės energijos elektronais, K sluoksnio elektronas gali gauti energijos kiekį, pakankamą išlėkti iš atomo. Tokio atomo kitų sluoksnių elektronams pereinant į K sluoksnyje susidariusią vakansiją, išspinduliuojama K serijos atitinkama spektro linija. Kai vakansija susidaro L sluoksnyje, tuomet, užimant ją M, N ar kito tolimesnio sluoksnio elektronams, spinduliuojamos L serijos linijos.

1913 m. H. Mozlis atrado dėsnį, apibūdinantį Rentgeno spindulių būdingojo spektro linijų dažnio  $\nu$  ir atominio skaičiaus  $Z$  sąryšį. Pagal šį dėsnį  $K_\alpha$  linijos dažnį galima išreikšti šitaip:

$$\nu_{K_\alpha} = R(Z-1)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right); \quad (5)$$

čia  $R$  - Rydbergo konstanta. Linijai  $K_\beta$  dažnis

$$\nu_{K_\beta} = R(Z-1)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right); \quad (6)$$

linijai  $L_\alpha$  dažnis

$$\nu = R(Z-\sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right); \quad (7)$$

Serijos konstanta  $\sigma$  vadinama ekranavimo konstanta,  $n$  ir  $m$  – atitinkami sveikieji skaičiai. Dažniausiai Mozlio dėsnis užrašomas šitaip:

$$\sqrt{\nu} = a(Z-\sigma); \quad (8)$$

čia  $a$  - kiekvienai serijos linijai būdinga konstanta. Tuomet Mozlio dėsnis nusakomas šitaip: kvadratinė šaknis iš dažnio yra atominio skaičiaus tiesinė funkcija. Branduolio teigiamo krūvio ekranavimo efektas jį supančiais elektronais įvertinamas ekranavimo konstanta  $\sigma$ .

Būdingųjų Rentgeno spektrų dėsningumai visiškai patvirtina elektronų sluoksninį pasiskirstymą atome.

Nuostabi Rentgeno spindulių savybė yra ta, kad jie praeina pro daugelio kūnų gana storą medžiagos sluoksnį. Bugerio dėsnis užrašomas šitaip:

$$I = I_0 e^{-\alpha x}; \quad (9)$$

čia  $I_0$  - krintančių Rentgeno spindulių intensyvumas,  $I$  - praėjusių  $x$  storio medžiagos sluoksni intensyvumas,  $\alpha$  - Rentgeno spindulių slopinimo koeficientas. Rentgeno spindulių srautas medžiagoje slopsta dėl dviejų procesų: fotoefekto (fotonų nelieka - įvyksta tikroji absorbcija) ir Komptono reiškinių (sumažėja fotonų energija). Praktiniu požiūriu svarbiausio diapazono ( $\lambda = 0.2 - 2\text{Å}$ ) Rentgeno spinduliai silpsta dėl fotoefekto. Tuomet dydis  $\alpha$  labai priklauso nuo elemento atominio skaičiaus  $Z$  ir bangos ilgio

$$\alpha \approx CZ^4 \lambda^3; \quad (10)$$

čia konstanta  $C$  priklauso nuo medžiagos tankio. Šiuo sąryšiu pagrįsta rentgeno defektoskopija ir rentgenodiagnostika. Tiems tikslams gerai tinka stabdomasis Rentgeno spinduliavimas.

Praktiškai taikomos ir kitos Rentgeno spindulių savybės. Rentgeno spindulių difrakcija paremti kristalų struktūros tyrimo metodai. Tiems tikslams ypač gerai tinka būdingieji Rentgeno spinduliai, tačiau monokristalų struktūra tiriama ir su ištisiniu Rentgeno spektru.

Rentgeno spindulių biologinis veikimas taikomas rentgenoterapijoje. Jie slopina navikų augimą, sukelia jų irimą, nuskausmina, mažina organizmo jautrumą, padeda gydyti uždegimus.

Kuriami Rentgeno spinduliais veikiantys prietaisai, pavyzdžiui, Rentgeno mikroskopai. Juose padidintas mikroobjekto atvaizdas sukuriamas Rentgeno spindulių srautu. Pradėjus naudoti keitiklius, kurie Rentgeno spindulius paverčia regimąja šviesa, ir televiziją, tokiu mikroskopu galima operatyviai kontroliuoti objektų sandarą [5].

### ***Fonono sąvoka***

Kietuosiuose kūnuose šiluminiame judėjime dalyvauja kristalą sudarančios struktūrinės dalelės (atomai, molekulės, jonai) ir metaluose - dar laisvieji elektronai. Todėl kietųjų kūnų vidinė energija bendruoju atveju susideda iš dviejų dėmenų: 1) gardelės vidinės energijos, 2) elektroninių dujų (metaluose) vidinės energijos. Dabar nagrinėsime pirmąją dedamąją.

Kietojo kūno gardelės vidinė energija lygi gardelės mazguose esančių dalelių, vadinamų *oscilatoriais*, svyravimų energijos sumai. Kiekvieno oscilatoriaus energija lygi jo kinetinės ir tarpusavio sąveikos potencinės energijos sumai. Žinome, kad cikliniu dažniu  $\omega$  virpančio oscilatoriaus energijos pokytis  $\Delta W = n\hbar\omega$  (čia  $n = 1,2,3,\dots$  - sveikas skaičius) yra

kvantuotas. Išdava – gardelės energija gali kisti tik šuoliškai. Mažiausią oscilatoriaus (gardelės) energijos pokytį  $\Delta W = \hbar\omega$  vadina *energijos kvantu*.

Kietojo kūno dalelės viena kitą veikia stipriomis ryšio jėgomis, todėl jų virpesių pobūdis yra sudėtingas. Esant milžiniškam dalelių skaičiui (dalelių tankis  $\sim 10^{28} m^{-3}$ ) jų individualų judėjimą kristale aprašyti neįmanoma. Uždavinį tenka supaprastinti: vietoj atskiros dalelės judėjimo nagrinėjamas visų gardelės dalelių kolektyvinis virpėjimas. Tai daroma šitaip. Tarkime, kad absorbavus šviesos fotoną ar gavus šiluminių virpesių energiją iš kaimynų, oscilatoriaus energija šuoliškai pakito. Tuomet pakis oscilatoriaus virpesių pobūdis - oscilatorius susižadins. Dėl dalelių sąveikos bus žadinama ir aplinkinių dalelių virpesiai - kristalu sklis tamprioji banga. Ją vadina *šilumine banga*. Jų energija kinta diskrečiai, o tampriųjų bangų minimalų energijos pokytį, t.y. gardelės elementarų žadinimą, vadina *fononu*. Taigi, sužadintas oscilatorius savo perteklinę energiją perduoda šiluminei bangai, t.y. fononui, „sukurdamas“ vieną, o kartais kelis fononus. Pagal de Broilio idėją kiekvieną bangą galima pakeisti tam tikra kvazidalele (t.y. netikra dalele). Tuomet tampriajai bangai atitiks kvazidalelė, kuri ir vadinama fononu. Fonono energija lygi oscilatoriaus energijos kvanto energijai:

$$W = \hbar\omega; \quad (11)$$

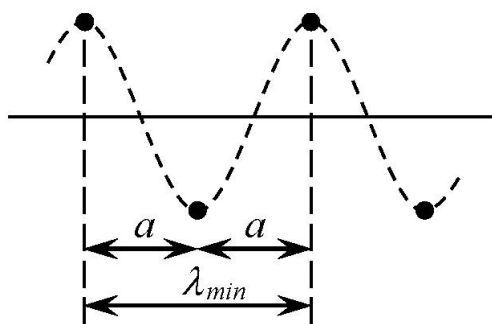
Naudojant fononų sąvoką paprasčiau yra tirti kietojo kūno savybes. Tuomet atomai, molekulės ar jonai bus jo struktūriniai vienetai, o fononai atliks judesio kietajame kūne nešėjų vaidmenį, t.y. dalelių šiluminiai virpesiai pakeičiami fononų srautu. Ši fononų visuma vadinama *fononinėmis dujomis*.

Fononai, kaip ir įprastinės bangos (pvz., akustinės), aprašomi tampriąsias bangas apibūdinančiais parametrais. Trumpai aptarkime juos.

1. Fononų dažnis  $\omega$  lygus jį sukūrusių oscilatorių virpesių dažniui. Pastarųjų dažnis priklauso nuo gretimų dalelių padėties, kuri yra atsitiktinė. Taigi, fononų dažnis yra įvairus, tačiau jis negali viršyti didžiausio dažnio  $\omega_m$ . Dydis  $\omega_m$  vadinamas *Debajaus dažniu*. Parodoma, kad

$$\omega_m = \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} u; \quad (12)$$

čia  $N$  - dalelių kristale skaičius,  $V$  - jo tūris,  $u$  - fononų fazinis greitis. Jis lygus tampriųjų bangų faziniam greičiui ( $u \sim 10^3 m/s$ ).



14 pav. Fononų bangos ilgis  $\lambda$

2. Fononų bangos ilgis  $\lambda$  yra ribotas:  $\lambda_{min} \leq \lambda \leq \lambda_{max}$ . Iš gardelės diskretinės struktūros išplaukia, kad joje negali susidaryti trumpesnės už  $\lambda_{min} = 2a$  bangos; čia  $a$  - gardelės konstanta (14 pav.). Fononų ilgiausia banga randama iš sąlygos  $\lambda_{max} = 2L$ ; čia  $L$  - kūno didžiausias tiesinis matmuo.

3. Kietojo kūno fizikoje vietoj bangos ilgio dažnai vartojamas bangos vektorius  $\vec{q}$  arba bangos skaičius  $|\vec{q}| = q = 2\pi / \lambda$ . Fononai, susidurdami tarpusavyje arba su gardelės defektais, išsisklaido. Jų sklaidai aprašyti fononui būtina priskirti impulsą (judesio kiekį)  $\vec{p}$ . Postuluojama, jog

$$\vec{p} = \hbar \vec{q}; \quad (13)$$

4. Kiekvieną netvarkingą osciliatoriaus virpesį galima išskaidyti į vieną išilginį ir du skersinius virpesius. Tuomet kristale gali susikurti ir trijų *poliarizacijų* fononai. Jas žymėsime indeksu  $a$  ( $a = 1, 2, 3$ ), jį priskirdami bangų vektoriui. Viena *poliarizacija*  $\vec{q}_1$  atitinka išilginę bangą, dvi kitos ( $\vec{q}_2, \vec{q}_3$ ) - tarpusavyje statmenai poliarizuotos skersinės bangos. Šių fononų energija ir impulsas yra vienodi, tačiau faziniai greičiai – skirtingi:  $v(\vec{q}_1) > v(\vec{q}_2)$  ir  $v(\vec{q}_3)$  bei anizotropiniuose kristaluose priklauso nuo sklidimo krypties.

Bangos dažnis ir bangos skaičius yra susieti dydžiai. Jų tarpusavis ryšys, t.y. funkcija  $\omega(q)$ , vadinamas *bangų dispersijos dėsniumi*. Jei bangos fazinis greitis  $u$  nepriklauso nuo dažnio  $\nu$  (čia  $\nu = \omega/2\pi$ ) ar bangos ilgio, tai dispersijos dėsnį galima nustatyti iš sąryšio  $u = \nu\lambda$  arba  $u = \nu / \lambda$ . Antrąją lygybę, padauginę iš  $2\pi$ , perrašome šitaip:

$$\omega = uq; \quad (14)$$

Taigi šiuo atveju dispersijos dėsnis yra *tiesinis*. Jis tinka fononams, kurių bangų skaičiaus vertės yra mažos (arba bangos ilgis - didelis). Tiesinis (14) ryšys tinka infragarsui, garsui ir netgi ultragarsui sklindant kristalais.

Tokiu būdu, pagal fononinį modelį kristalą galima pakeisti tokio pat tūrio „indu“, kurį užpildo fononinės dujos. Jų savybės priklauso nuo kristalo savybių (gardelės konstantos, dalelių tankio, akustinių bangų greičio ir kt). Fononams sukinytis nesuteikiamas, t.y. jų *sukinio*

*kvantinis skaičius*  $s = 0$ , todėl fononai yra *bozonai*. Fononų, kaip ir fotonų, kilmė yra šiluminė, todėl fononinių dujų *cheminis potencialas*  $\mu = 0$  [5].

### ***Radiaciniai defektai***

Kristalą apšaudant didelės energijos dalelių (protonų, neutronų, jonų) srautu arba švitinant kietaisiais elektromagnetiniais spinduliais, taip pat susidaro taškiniai defektai. Dalis energijos, perduotos tokioms detalėms arba spinduliavimo gardelės atomams (jonams), sunaudojama jų ryšiams nutraukti. Tokiu būdu sukurtieji defektai vadinami *radiaciniais*. Paprasčiausias radiacinis defektas yra Frenkelio defektas. Jam susidaryti reikalinga apie 14 – 35eV energijos.

Neretai kristalai apšaudomi dalelėmis, kurių kinetinė energija yra dešimčių MeV didumo. Tuomet kristalo atomui gali būti perduota dešimčių keV energija, šimtus ir tūkstančius kartų viršijanti defekto susidarymo energijos slenkstį. Tokios didelės energijos atomui judant kristale, išilgai judėjimo trajektorijos (keleto šimtų Å ilgio atkarpoje) sukuriama šimtai ir tūkstančiai taškinių defektų bei jų santalkų. Nutraukus kristalo švitinimą, radiaciniai defektai rekombinuoja, t. y. jų koncentracija mažėja. Taigi radiaciniai defektai yra *nepusiausvirieji* defektai [3].

### ***Silicis***

Silicis yra vienas iš labiausiai paplitusių elementų žemės plutoje (po deguonies) ir sudaro apie 28 % jos masės. Jis taip pat įeina į visų kosminių kūnų sudėtį, randamas ir tarpžvaigždinėje erdvėje. Gamtoje silicis laisvoje formoje nerandamas. Silicis randamas praktiškai visuose gyvūnų audiniuose bei organuose ir dalyvauja visuose gyvybę palaikančiuose procesuose.

Įvairių elementų, tame tarpe ir silicio, susidarymo Visatoje šaltinis yra branduolinės reakcijos, vykstančios žvaigždžių viduje.

### ***Silicio atomo sandara***

Periodinėje elementų sistemoje silicis yra IV grupėje betarpiškai po anglies, todėl daugeliu atvejų jis yra anglies analogas. Panašiai kaip anglis, silicis gali tiek atiduoti, tiek prijungti elektronus.

Yra žinomi trys stabilūs silicio izotopai:

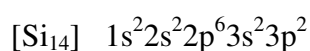
$Si_{28}^{14}$  - branduolį sudaro 14 protonų ir 14 neutronų;

$Si_{29}^{14}$  - branduolį sudaro 14 protonų ir 15 neutronų;

$Si_{30}^{14}$  - branduolį sudaro 14 protonų ir 16 neutronų.

Izotopai skiriasi tik neutronų skaičiumi branduolyje. Protonų skaičius duoto elemento atomo branduolyje yra visuomet pastovus ir tik jam būdingas.

To paties elemento izotopuose nesužadintoje būsenoje elektronų skaičius bei jų išsidėstymas orbitalėse (elektroniniame apvalkale) yra vienodas. Todėl visiems silicio izotopams jų atomų elektroninę konfigūraciją nesužadintoje būsenoje galima užrašyti:



Keturi išoriniai elektronai  $3s^2 3p^2$ , vadinami valentiniais elektronais, turi lemiamą įtaką silicio cheminėms savybėms.

Skaičiai 1,2,3,...,n nurodo elektrono priklausomybę duotai orbitalei. Jie taip pat yra ir pagrindiniai kvantiniai skaičiai, kurie jau reiškia ne vienos kurios tai orbitalės eilės numerį, o visų elektronų orbitalių sluoksnio numerį. Pirmas sluoksnis yra arčiausiai branduolio.

Simboliai s, p, d ir f kartu su pagrindiniu kvantiniu skaičiumi n apibūdina elektronų (atome) energetinį lygmenį. Laipsnio rodikliai parodo kiek elektronų yra duotame lygmenyje.

Kiekviename lygmenyje gali būti tam tikras, maksimalus elektronų skaičius: lygmenyje s – 2, p – 6, d – 10 ir f – 14 elektronų. Užpildžius vieną lygmenį sekantis elektronas užima vietą jau tolimesniame lygmenyje, tame pačiame ar sekančiame elektronų sluoksnyje.

Pagal Paulio draudimo principą viename atome negali būti du elektronai su visais keturiais vienodais kvantiniais skaičiais (n - pagrindinis kvantinis skaičius, l - šalutinis kvantinis skaičius, m - magnetinis kvantinis skaičius,  $\sigma$  - elektrono spinas,  $\sigma = \pm 1/2$ ). Kiekvienoje orbitalėje su tam tikrais n, l ir m gali tilpti maksimaliai du elektronai, bet jie turi turėti priešingus spinus  $\sigma$  (priešingos krypties sukinius).

Iš Paulio dėsnio seka, kad elektronai duotame lygmenyje užpildo laisvas vietas taip, kad turėtų tuos pačius spinus (sukinius), t.y. pirmiausia užsipildo duoto lygmens vietas (langeliai) pavieniais elektronais. Ir tik tai, kai duotame lygmenyje visuose "langeliuose" yra po vieną elektroną, sekantis, įeinantis į lygmenį, elektronas sudaro porą su jau esančiu.



Tuo būdu silicio atomo elektronų apvalkalo struktūrą galima pavaizduoti:

6 lentelė  
Silicio elektronų apvalkalo struktūra

	s							
K	↓↑	p						
L	↓↑	↑↓	↑↓	↑↓	d			
M	↓↑	↑	↑					

### *Fizikinės silicio savybės*

Silicio kietumas pagal Moso skalę - 7, tačiau dėl didelio trapumo lengvai sutrinamas į miltelius, mikrokietumas -  $1,7 \cdot 10^4$  MPa. Tankis priklauso nuo kristalų dydžio. Taip vadinamo amorfinio (mikrokristalinio) –  $2350 \text{ kg/m}^3$ , o kristalinio –  $2420 \text{ kg/m}^3$ . Lydymosi temperatūra –  $1423 \text{ }^\circ\text{C}$ , virimo –  $3247 \text{ }^\circ\text{C}$ . Temperatūrinis linijinio plėtimosi koeficientas, esant  $24 - 1000 \text{ }^\circ\text{C}$  temperatūrai, atitinkamai  $2,33 \cdot 10^{-6} - 4,8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ . Terminės ir elektrinės silicio savybės priklauso nuo silicio švarumo ir kristalų dydžio, taip pat nuo temperatūros.

### *Liuminescencija*

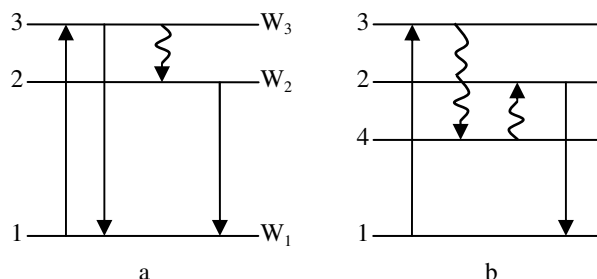
Liuminescencija vadinamas kūnų nepusiausvirasis elektromagnetinis spinduliavimas (švytėjimas), kurį sukelia nešiluminis energijos šaltinis. Jis gali būti gaunamas ir gana žemose temperatūrose, todėl liuminescencija dar vadinama šaltuoju švytėjimu. Liuminescencija klasifikuojama pagal jos žadinimo būdą, energijos virsmų mechanizmą ir švytėjimo trukmę.

Pagal sužadinimo būdą skiriama fotoluminescencija (ji sužadinama apšvietus), radioluminescencija – sužadinama jonizuojančiu spinduliavimu (prie jos priskiriama rentgenoluminescencija, katodoluminescencija, jonoluminescencija,  $\alpha$  - liuminescencija bei liuminescencija veikiant neutronais), elektroluminescencija (žadinama elektriniu lauku), chemiluminescencija (švytėjimas vykstant cheminiams virsmams), triboluminescencija (švytėjimas dėl kūnų trinties).

Pagal švytėjimo trukmę skiriama fluorescencija ir fosforescencija. Pirmasis švytėjimas pranyksta po  $10^{-8}$  s ar dar greičiau po to, kai nutraukiamas žadinantis poveikis. Jis naudojamas fluorescencinėse lempose, fluorescenciniuose ekranuose ir kitur.

Fosforescencija yra toks liuminescencinis švytėjimas, kuris tam tikrą laiką išlieka nutraukus jį žadinantį poveikį. Ji gali trukti nuo sekundės iki kelių valandų arba net parų. Fosforescencija naudojama elektroniniuose vamzdžiuose, scintiliaciniuose skaitikliuose ir kitur.

Pagal liuminescencijos elementarių procesų mechanizmą skiriama rezonansinė, savaiminė, priverstinė (metastabilioji) ir rekombinacinė liuminescencija. Liuminescencijos elementarusis aktas susideda iš energijos absorbcijos, dėl ko vyksta atomo (molekulės) kvantinis šuolis iš pagrindinės būsenos 1 (15 pav., a)



15 pav. Kvantiniai šuoliai

į sužadavimo lygmenį 3, nespindulinio šuolio ( $3 \rightarrow 2$ ) ir spindulinio šuolio ( $2 \rightarrow 1$ ). Lygmuo 2 vadinamas spinduliavimo lygmeniu.

Kai kuriose medžiagose liuminescencinis spinduliavimas gali prasidėti elektronui tiesiogiai peršokant iš sugadinimo lygmens 3 į pagrindinę būseną 1. Pagal šitokį mechanizmą vykstanti liuminescencija vadinama rezonansine. Ji stebima cheminių elementų garuose, kai kuriose nesudėtingose molekulėse, o kartais ir sudėtingesnėse sistemose.

Dažnai nespindulinio šuolio  $3 \rightarrow 2$  tikimybė yra didesnė negu rezonansinio šuolio  $3 \rightarrow 1$ . Tuomet, jeigu lygmuo 2 yra žemiau lygmens 3, elektronas, šiluminės energijos pavidalu perdavęs kitam atomui energijos perteklių, peršoka į lygmenį 2. Iš jo vykstant spinduliniam šuoliui, liuminescencinės šviesos dažnis  $\omega' = (W_2 - W_1)/\hbar$  yra mažesnis už ją sužadinusio šviesos dažnį  $\omega = (W_3 - W_1)/\hbar$ . Šitokį dėsningumą 1852 m. pirmasis pastebėjo anglų fizikas Dž. Stoksas (Stokes). Tačiau lygmuo  $W_2$  gali būti ir aukščiau  $W_3$ . Tuomet jau sužadintas atomas, dar gavęs papildomai šiluminės energijos, nespinduliniu šuoliu peršoka į 2 lygmenį. Dabar savaiminio spinduliavimo šuolio  $2 \rightarrow 1$  liuminescencinės šviesos dažnis  $\omega' > \omega$ . Taip gaunama vadinamoji antistoksinė liuminescencija.

Spindulinio šuolio lygmuo 2 gali priklausyti fotoną sugėrusiam atomui (molekulei) arba kitam atomui. Pirmuoju atveju toks atomas vadinamas liuminescencijos centru. Nagrinėjamais atvejais šuolis iš spinduliavimo lygmens  $2 \rightarrow 1$  vyksta savaime, dėl to vykstanti liuminescencija vadinama spontanine. Ji būdinga garų ir skysčių sudėtingoms molekulėms, taip pat priemaišiniams kristalams.

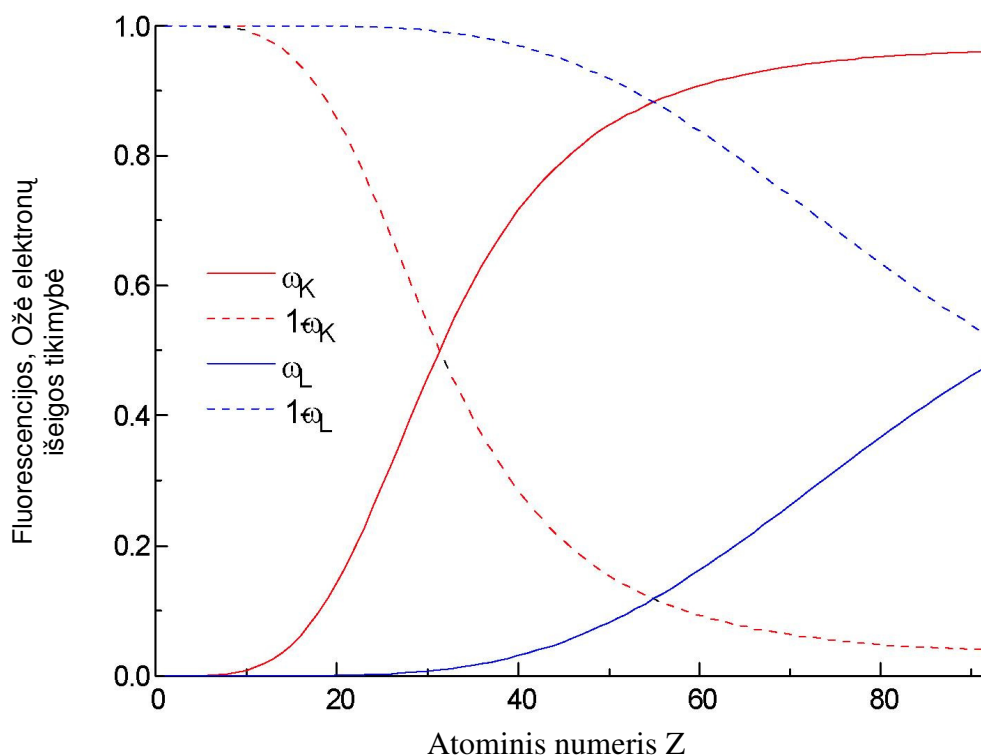
Metastabilioji liuminescencija vyksta, kai elektronas iš sužadavimo lygmens 3 peršoka į metastabilų lygmenį 4 (15 pav., b). Po to papildomai sugėręs, pavyzdžiui, infraraudonojo

spinduliavimo fotoną ar fononą, priverstinai peršoka į spinduliavimo lygmenį 2. Gautasis švytėjimo būdingas fosforescentuojantiems priemaišiniams kristalams.

Švytėjimas, gaunamas susijungiant toms dalelėms, kurios prieš tai sugėrusios energiją, atsiskyrė viena nuo kitos, vadinamas rekombinaciniu. Dujose gali rekombinuoti elektronas su teigiamuoju jonu ar teigiamasis jonas su neigiamuoju jonu, puslaidininkuose – elektronas su skylė ar jonizuota donorine priemaiša ir t.t. [3].

### ***Ožė efektas***

Ožė efektas, fluorescenciniai fotonai, bei šalutinė sąveika: tai gali atsirasti tik po fotoelektrinio sugėrimo (16 pav.).



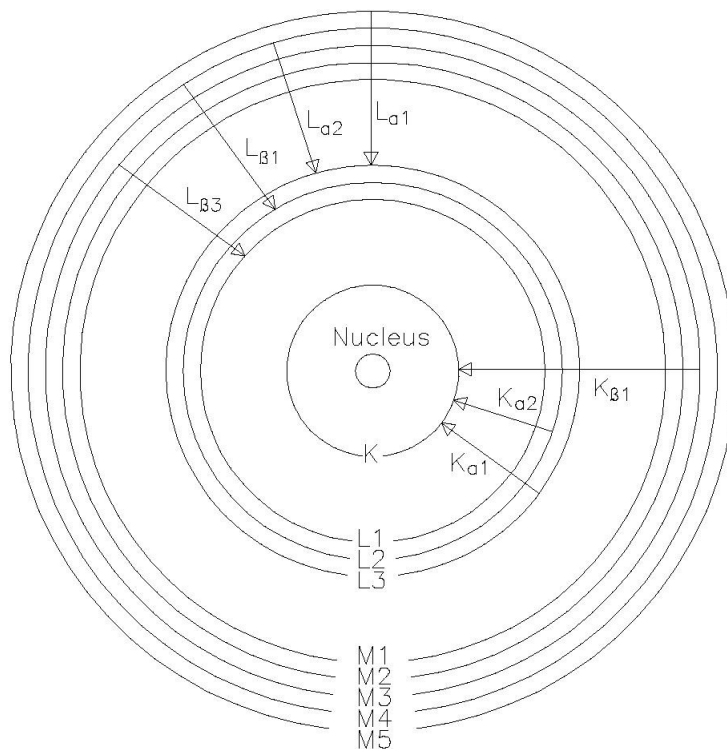
16 pav. Fluorescencija ir Ožė elektronai

Fluorescencijos ir Ožė elektronų išeigos tikimybę atitinka elementų atominiai numeriai Z (grafikai nubrėžti panaudojus literatūroje pateikiamus duomenis).

### ***Spektro charakteristika***

Tai nusako pagrindinę pradinės fluorescencijos analizę. Tai susideda iš eilės atskirų energijų atitinkančių energijos skirtumą tarp dviejų atominių lygmenų ir todėl įtakoja išspinduliuojamoms dalelėms.

Kai iš K-sluoksnio elektronas yra išmušamas, atsiradusi laisva vieta gali būti užpildyta kitu elektronu iš L-sluoksnio. Tuomet elektronai priklausantys kitiems energijos lygmenims taip pat išmušami ir jų vietose atsiranda vakancijos.



17 pav. Atominiai sluoksniai ir posluoksniai

$$\Delta_n \neq 0$$

$$\Delta_l = \pm 1$$

$$\Delta_j \neq \pm 1, 0$$

7 lentelė

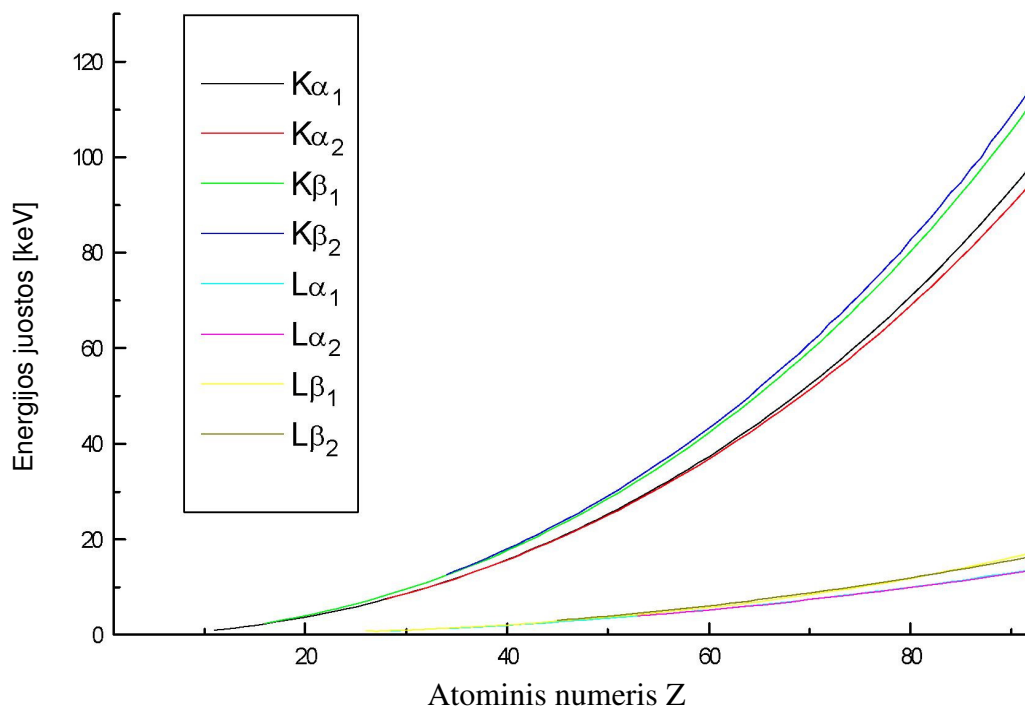
Elektroniniai šuoliai

Perėjimo linija	Elektrono perėjimas	Perėjimo linija	Elektrono perėjimas
$K\alpha_1$	K-L3	$L\alpha_1$	L3-M5
$K\alpha_2$	K-L2	$L\alpha_2$	L3-M4
$K\beta_1$	K-M3	$L\beta_1$	L2-M4
$K\beta_2$	K-N2, N3	$L\beta_2$	L3-N5
$K\beta_3$	K-M2	$L\beta_3$	L1-M3
		$L\beta_4$	L1-M2

Mosley buvo pirmasis, kuris ištyrė ir nustatė ryšį tarp elemento atominio skaičiaus ir energijos spektro linijų. Ir aprašė formule:

$$E(Z) = k_j(Z - \sigma_j)^2; \quad (15)$$

čia  $k_j$  ir  $\sigma_j$  yra fiksuota dėl tam tikro perėjimo j.

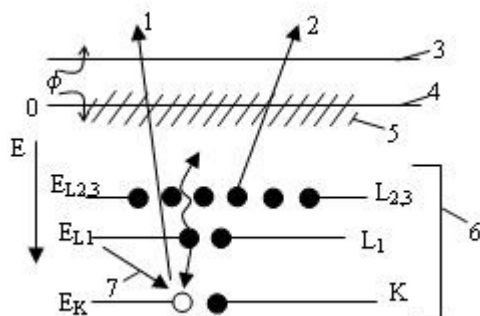


18 pav. Svarbiausios energijos juostos atitinkančios atominį numerį Z

### ***Ožė elektronų spektroskopija***

Ožė elektronų spektroskopija naudojama cheminės sudėties mikronevienodumui ir elementų pasiskirstymui paviršiuje tirti, o taip pat informacijai apie cheminį elementų būvį gauti.

Pirminis  $E_p$  energijos elektronų srautas bandinio paviršiuje sužadina atomus, gaunama antrinių elektronų emisija. Maža jų dalis ( $10^{-5}$  eilės), taip vadinami Ožė elektronai palieka bandinį vykstant beradijaciniais tarporbitiniams perėjimams. Jonizuojantis atomui, elektronas pereina iš aukštesnio energetinio lygio į vakanciją, išmesdamas Ožė elektroną. Elektronas gali pereiti į nesužadintą būseną neišspinduliuodamas rentgeno spindulių kvantą.



19 pav. Energetinių lygių schema parodanti OŽe elektronų ir fotoemisijos procesus:

- 1 – fotoelektronas, 2 – OŽe elektronas ( $KL_1L_{2,3}$ ), 3 – vakuomo lygis,  
 4 – Fermi lygis, 5 – valentinė zona, 6 – vidiniai lygiai, 7 – elektronų srautas  
 arba Rentgeno spinduliavimas,  $\phi$  – išėjimo darbas.

Schemoje parodytas elektrono išėjimas iš K lygio ir OŽe elektrono iš  $L_{2,3}$  lygio ( $KL_1L_{2,3}$  elektronas), veikiant  $h\nu$  kvantų energijos išoriniam spinduliavimo srautui. Dažnai pastebima elektronų emisija, dalyvaujant valentinei zonai; KLV, KVV – perėjimai ir pan.

Esant OŽe emisijai, įvertinant atomo dvigubos jonizacijos efektą, galima paskaičiuoti elektrono energiją:

$$E_{KL_1L_{2,3}} = E_K(Z) - E_{L_1}(Z) - E_{L_{2,3}}(Z + \Delta) - \phi_a; \quad (16)$$

čia:  $\phi_a$  – energijos analizatoriaus darbinė funkcija;

Z – elemento, dalyvaujančio emisijoje, atominis numeris;

$\Delta$  – viršatominės relaksacijos energija, surišta su dvigubos vakancijos susidarymu, lygi nuo 0,5 iki 1,5 Ev.

OŽe elektronų srovės dydis nustatomas pagal daugelį faktorių, tarp kurių galima išskirti svarbiausius:

$$I_a = I_p R \sigma_i \times (E_p, E_u) \times R_i(E_p, x_i) \times \lambda_j(E_p, x_i) \times F(\Omega_1 T) \times x_i; \quad (17)$$

čia:  $I_p$  – pirminio pluošto srovė;

R – paviršiaus šiurkštumo faktorius;

$\sigma_i$  – i lygio jonizacijos skerspjūvis, kuris priklauso nuo pirminio pluošto energijos;

$R_i$  – atvirkštinio išsklaidymo koeficientas;

$\lambda_i$  – elektrono laisvo perėjimo ilgis (išėjimo gylis);

F – geometrinis parametras, charakterizuojantis energijos analizatorių;

$x_i$  – i komponento atominė koncentracija analizuojamo tūrio paviršiuje.

Nors Ožė elektronai gali susižadinti ir rentgeno spindulių poveikyje, tačiau Ožė elektronų spektroskopijoje naudojamas elektroninis sužadimas, nes šiuo atveju daugiau susidaro Ožė elektronų.

Atomo lygio jonizacijos skerspjūvis, veikiant pirminių elektronų srautui, aprašomas lygtimi:

$$\sigma_i E_i^2 = 6,51 \times 10^{-4} B_i Z_i \times L_n(C_i U_i) / U_i; \quad (18)$$

čia:  $U_i = E_p / E_i$

$E_p$  ir  $E_i$  – pirminių elektronų ir jonizacijos orbitalės energija;

$Z_i$  – elektronų skaičius lygyje;

$B_i$  ir  $C_i$  – konstantos ( $i$  – charakterizuoja K arba L lygį).

Tamprioji sklaida ir elektronų išėjimo gylis turi įtakos Ožė elektronų srauto intensyvumui ir tai reikia įvertinti atliekant cheminės sudėties kiekybinę analizę. Tampriai išsklaidyti elektronai, praeidami per medžiagos tūrį, gali iššaukti atomų jonizaciją. Šis procesas padidina bendrą Ožė elektronų susidarymą. Elektronų išėjimo gylis arba laisvas perėjimas yra jo kinetinės energijos funkcija:

$$\lambda = (538 / E^2) + 0,41(hE)^{0,5}; \quad (19)$$

Ožė elektronų emisijos intensyvumas priklauso nuo objekto kristalografinės orientacijos ir tai žymiai pastebima tyrinėjant monokristalus. Ožė signalų intensyvumų skirtumui turi įtakos nevienodas atomų tankis kristalografinėse plokštumose arba plokštumų tankis, lygiagrečių tiriamam paviršiui. Plastinė deformacija padidina kristalo defektų tankį, sumažina kristalografinį kontrastą.

Ilgą laiką skyrimo paviršių fizikiniai-cheminiai tyrimai nebuvo atliekami, nes nebuvo aparatų plonų sluoksnių tyrimui. Tai tapo galima sukūrus paviršiniai jautrius analitinius elektroninės spektroskopijos metodus. Ožė elektronų spektroskopijos metodu galima nustatyti labai mažus elementų kiekius. Pvz. mažiausia boro koncentracija silicio paviršiuje, kurią galima nustatyti yra  $10^{-4} \%$  (pagal masę). Naudojant sinchrotroninius spinduliavimo šaltinius su dideliu spindulio energijos tankiu, jautrumo riba padidėja iki  $10^{-6} \%$  (pagal masę) [5].

***Junginių relaksacijos procesų dinamikos kristalinėje Si gardelėje tyrimai švitinant Rentgeno spinduliais***

Švitinant Rentgeno spinduliais susidaro vakancijos taip sukuriama Braggo atspindžiai ir generuojamos gardelės osciliacijos:

$$\frac{I_i}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2 \langle u_i^2 \rangle (\sin \vartheta / \lambda)^2\right); \quad (20)$$

$$\langle u(t)^2 \rangle = \langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_v^2 \rangle; \quad (21)$$

Įstačius  $\langle u(t)^2 \rangle$  vietoj  $\langle u_i^2 \rangle$  į (1) gaunama:

$$\frac{I(t)}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2 (\langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_v^2 \rangle) (\sin \vartheta / \lambda)^2\right); \quad (22)$$

Padalijus (22) iš (20) randamas atomų vidutinis kvadratinis nuokrypis priklausantis nuo laiko:

$$i = \sqrt{\langle u(t)_v^2 \rangle} = \frac{\sqrt{\ln \frac{I_i}{I(t)}}}{\frac{4\pi \sin \vartheta}{\sqrt{3} \lambda}} \quad (23)$$

$I_0$  – krentančių spindulių srauto intensyvumas;

$I_i$  – atsispindėjusių spindulių srauto intensyvumas;

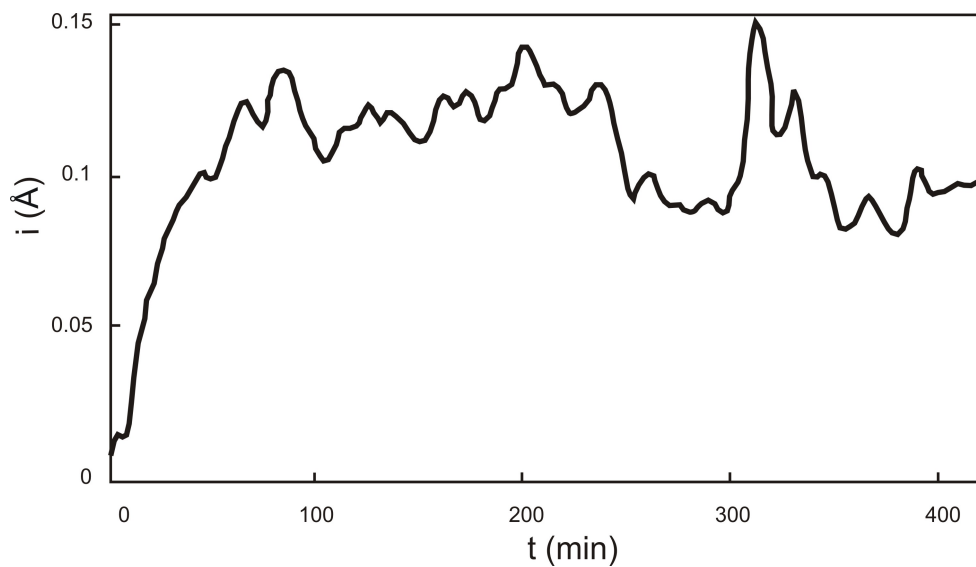
$I(t)$  – pradiniu laiko momentu generuojamos vakancijos;

$\lambda$  – Rentgeno spindulių pluošto bangos ilgis ( $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ );

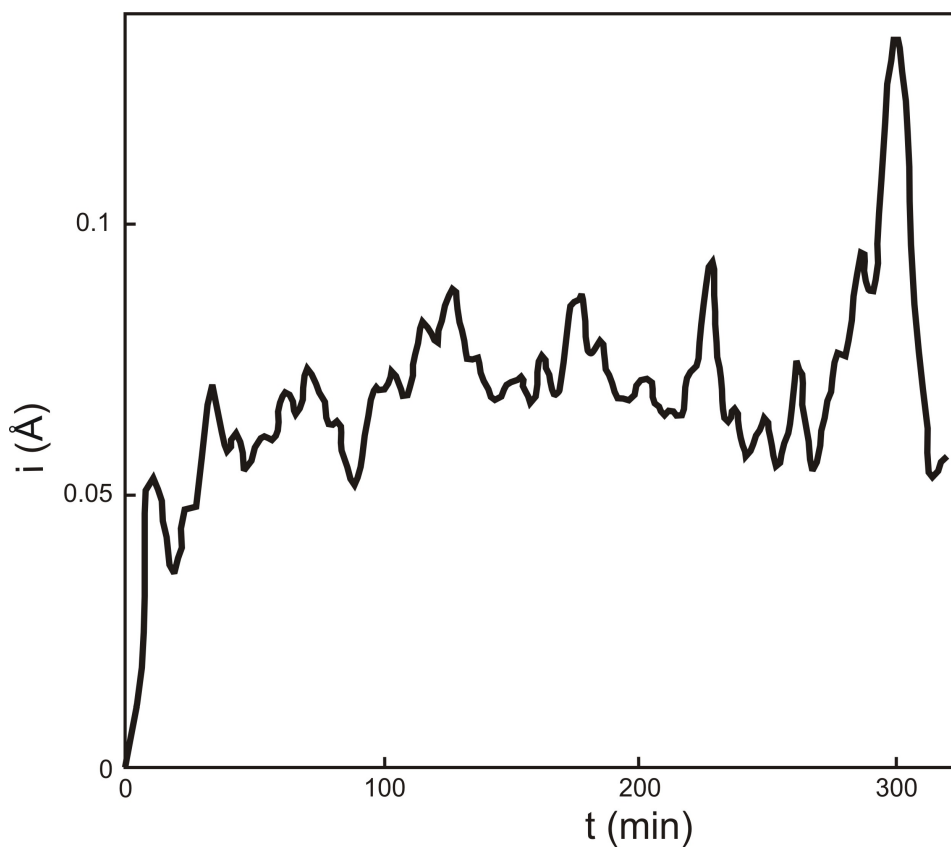
$\vartheta$  – fiksuotas difrakcijos kampas ( $47.48^\circ$ );

$i = \sqrt{\langle u(t)_v^2 \rangle}$  – atomų nukrypimai nuo pusiausvyros padėties laiku  $t_i$ .





20 pav. Atomų nukrypimai nuo pusiausvyros padėties laiko intervale



21 pav. Atomų nukrypimai nuo pusiausvyros padėties laiko intervale

Skaiciavimai atlikti „MathCad 2001 Professional“ programa, imant įvairius laiko intervalus (20 ir 21 pav.), gauti tokie atomų nuokrypiai nuo pusiausvyros padėties:

$$I_{t_1} := 0.115 \cdot 10^{-10} \text{ (m)} \quad I_{i_1} := 0.126 \cdot 10^{-10} \text{ (m)}$$

$$I_{t_2} := 0.132 \cdot 10^{-10} \text{ (m)} \quad I_{i_2} := 0.143 \cdot 10^{-10} \text{ (m)}$$

$$I_{t_3} := 0.125 \cdot 10^{-10} \text{ (m)} \quad I_{i_3} := 0.132 \cdot 10^{-10} \text{ (m)}$$

$$I_{t_4} := 0.065 \cdot 10^{-10} \text{ (m)} \quad I_{i_4} := 0.075 \cdot 10^{-10} \text{ (m)}$$

$$I_{t_5} := 0.092 \cdot 10^{-10} \text{ (m)} \quad I_{i_5} := 0.1 \cdot 10^{-10} \text{ (m)}$$

$$I_{t_6} := 0.11 \cdot 10^{-10} \text{ (m)} \quad I_{i_6} := 0.145 \cdot 10^{-10} \text{ (m)}$$

$$i_1 := \frac{\sqrt{\ln\left(\frac{I_{i_1}}{I_{t_1}}\right)}}{4 \cdot \pi \cdot \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{3}} \cdot \lambda} \quad i_1 = 8.707 \times 10^{-12} \text{ (m), kai } t_0 = 150 \text{ min}$$

$$i_2 := \frac{\sqrt{\ln\left(\frac{I_{i_2}}{I_{t_2}}\right)}}{4 \cdot \pi \cdot \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{3}} \cdot \lambda} \quad i_2 = 8.15 \times 10^{-12} \text{ (m), kai } t_0 = 195 \text{ min}$$

$$i_3 := \frac{\sqrt{\ln\left(\frac{I_{i_3}}{I_{t_3}}\right)}}{4 \cdot \pi \cdot \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{3}} \cdot \lambda} \quad i_3 = 6.725 \times 10^{-12} \text{ (m), kai } t_0 = 210 \text{ min}$$

$$i_4 := \frac{\sqrt{\ln\left(\frac{I_{i_4}}{I_{t_4}}\right)}}{4 \cdot \pi \cdot \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{3}} \cdot \lambda} \quad i_4 = 1.09 \times 10^{-11} \text{ (m), kai } t_0 = 270 \text{ min}$$

$$i_5 := \frac{\sqrt{\ln\left(\frac{I_{i_5}}{I_{t_5}}\right)}}{4 \cdot \pi \cdot \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{3}} \cdot \lambda} \quad i_5 = 8.319 \times 10^{-12} \text{ (m), kai } t_0 = 300 \text{ min}$$

$$i_6 := \frac{\sqrt{\ln\left(\frac{I_{i_6}}{I_{t_6}}\right)}}{4 \cdot \pi \cdot \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{3}} \cdot \lambda} \quad i_6 = 1.514 \times 10^{-11} \text{ (m), kai } t_0 = 320 \text{ min}$$

## Elektronų ryšio energija silicio atome

8 lentelė

Silicio elektroninė ryšio energija

Elementas	Posluoksniai				
	K (1s)	L <sub>1</sub> (2s)	L <sub>2,3</sub> (2p)	M <sub>1</sub> (3s)	M <sub>2,3</sub> (3p)
14 Si	1844 eV	154 eV	104 eV	13,46 eV	8,15 eV

$$E = E_{o\check{z}e} + h\nu; \quad (24)$$

$h$  – Planko konstanta ( $6,626 \cdot 10^{-34}$  J·s);

$\nu$  – elektromagnetinės bangos virpesių dažnis ( $s^{-1}$ );

$e$  – elementarusis elektros krūvis ( $1,602 \cdot 10^{-19}$  C).

$$E := \begin{pmatrix} 1844 \\ 154 \\ 104 \\ 104 \\ 13.46 \\ 8.15 \end{pmatrix} \text{ (eV)} \quad h = 4.136 \times 10^{-15} \text{ (eV}\cdot\text{s)}$$

$$\nu_1 := \frac{(1844 - E)}{h} \quad \nu_2 := \frac{(154 - E)}{h} \quad \nu_3 := \frac{(104 - E)}{h} \quad \nu_4 := \frac{(13.46 - E)}{h}$$

$$\nu_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 4.086 \times 10^{17} \\ 4.207 \times 10^{17} \\ 4.207 \times 10^{17} \\ 4.426 \times 10^{17} \\ 4.439 \times 10^{17} \end{pmatrix} \text{ (s}^{-1}\text{)} \quad \nu_2 = \begin{pmatrix} -4.086 \times 10^{17} \\ 0 \\ 1.209 \times 10^{16} \\ 1.209 \times 10^{16} \\ 3.398 \times 10^{16} \\ 3.526 \times 10^{16} \end{pmatrix} \text{ (s}^{-1}\text{)}$$

$$\nu_3 = \begin{pmatrix} -4.207 \times 10^{17} \\ -1.209 \times 10^{16} \\ 0 \\ 0 \\ 2.189 \times 10^{16} \\ 2.317 \times 10^{16} \end{pmatrix} \text{ (s}^{-1}\text{)} \quad \nu_4 = \begin{pmatrix} -4.426 \times 10^{17} \\ -3.398 \times 10^{16} \\ -2.189 \times 10^{16} \\ -2.189 \times 10^{16} \\ 0 \\ 1.284 \times 10^{15} \end{pmatrix} \text{ (s}^{-1}\text{)}$$

$$v_1 := \begin{pmatrix} 4.086 \times 10^{17} \\ 4.207 \times 10^{17} \\ 4.426 \times 10^{17} \\ 4.439 \times 10^{17} \end{pmatrix} (\text{s}^{-1})$$

$$v_2 := \begin{pmatrix} 1.209 \times 10^{16} \\ 3.398 \times 10^{16} \\ 3.526 \times 10^{16} \end{pmatrix} (\text{s}^{-1})$$

$$v_3 := \begin{pmatrix} 2.189 \times 10^{16} \\ 2.317 \times 10^{16} \end{pmatrix} (\text{s}^{-1})$$

$$v_4 := 1.284 \times 10^{15} (\text{s}^{-1})$$

$$c = 3 \times 10^8 (\text{m/s})$$

$$\lambda_1 := \frac{c}{v_1}$$

$$\lambda_2 := \frac{c}{v_2}$$

$$\lambda_3 := \frac{c}{v_3}$$

$$\lambda_4 := \frac{c}{v_4}$$

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 7.342 \times 10^{-10} \\ 7.131 \times 10^{-10} \\ 6.778 \times 10^{-10} \\ 6.758 \times 10^{-10} \end{pmatrix} (\text{m})$$

$$\lambda_2 = \begin{pmatrix} 2.481 \times 10^{-8} \\ 8.829 \times 10^{-9} \\ 8.508 \times 10^{-9} \end{pmatrix} (\text{m})$$

$$\lambda_3 = \begin{pmatrix} 1.37 \times 10^{-8} \\ 1.295 \times 10^{-8} \end{pmatrix} (\text{m})$$

$$\lambda_4 = 2.336 \times 10^{-7} (\text{m})$$

### *Išvados*

- išnagrinėti galimi Ožė perėjimai Si kristale;
- pateiktas matematinis modelis leidžia mums atlikti relaksacijos procesų tyrimus Si kristale;
- vakancijose keičiantis krūviui, keičiasi nutraukti ryšiai ir jos sąveikauja su gardele. Taip atsiranda relaksacijos Si kristale;
- į vakancijas elektronai pereina iš laidumo arba valentinės energijos juostos;
- gardelės deformacijos atsiranda, kai vakancijos yra užpildomos elektronais;
- atlikus skaičiavimus, gautas minimalus (kai  $t_0 = 210$  min) ir maksimalus (kai  $t_0 = 320$  min) atomų nukrypimas nuo pusiausvyros padėties. Minimalus sudaro 1,2 %, o maksimalus – 2,8 % silicio gardelės konstantos ( $d = 5,42 \text{ \AA}$ ) dydžio.

### *Literatūra*

1. Brazdžiūnas P. Bendroji fizika I dalis. Vilnius, 1960.
2. Brazdžiūnas P. Bendroji fizika III dalis. Vilnius, 1963.
3. Brazdžiūnas P. Bendroji fizika IV dalis. Vilnius, 1965.
4. Juodviršis A., Mikalkevičius M., Vengris S. Puslaidininkų fizikos pagrindai. Vilnius, 1985.
5. Požela I., Radvilavičius Č. Optika ir atomo fizika. Kaunas, 2003.
6. Tamašauskas A., Vosylius J., Požela I. Fizika 4. Vilnius, 1995.
7. George D. Watkins. Intrinsic defects in silicon // Materials Science in Semiconductor processing. Volume 3, Issue 4, 1 August 2000, p. 227-235.
8. George D. Watkins. EPR of Defects in Semiconductors: Past, Present, Future // Физика твердого тела, том 41, вып. 5, 1999.
9. Janavičius J. A., Purlys R., Norgėla Ž. Investigation of Compound Relaxation Processes in Crystal Lattice Dynamics of Si Irradiated by Soft X-rays // Acta Physica Polonica. Volume 109, No 2, 2006, p. 159-169.
10. Giuseppe Dalba, La Fisica dei Raggi X, Dipartimento di Fisica, Università di Trento, a. a. 1999-2000.
11. Караэия Р. Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов. Vilnius, 1987.
12. Electron-atom interaction, 2000.  
[http://www.matter.org.uk/tem/electron\\_atom\\_interaction/x-ray\\_and\\_auger.htm](http://www.matter.org.uk/tem/electron_atom_interaction/x-ray_and_auger.htm).