

„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych” (1101-4FS22)

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

OBSADZENIE STANÓW DOMIESZKOWYCH W STANIE RÓWNOWAGI TERMODYNAMICZNEJ

Obsadzenie poziomów domieszkowych

„Obsadzanie” stanów (nie tylko zlokalizowanych – domieszek czy defektów, ale także stanów pasmowych) elektronami oznacza **wymianę cząstek (elektronów) pomiędzy rezerwuarem i rozważanym podukładem**.



wielki zespół kanoniczny (podukład wymienia cząstki i energię z otoczeniem)



Prawdopodobieństwo termodynamiczne (nieunormowane) znalezienia podukładu w stanie j , w którym znajduje się n_j cząstek (elektronów) i w którym energia podukładu wynosi E_j (jest to całkowita energia, obejmująca wszystkie n_j cząstek):

$$P_j = e^{-\beta(E_j - n_j \mu)} \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad \mu - \text{potencjał chemiczny}$$

Suma statystyczna:

$$Z = \sum_j P_j = \sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \mu)}$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Średnie statystyczne:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_j A_j e^{-\beta(E_j - n_j \mu)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \mu)}}$$

Przykład 1 – elektron swobodny obsadzający (lub nie)
jednoelektronowy stan o danym k i danym spinie:

możliwe 2 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle =$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład 2 – obsadzanie przez elektrony swobodne stanu elektronowego o danym k (spin dowolny):

możliwe 4 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E \text{ (spin } \uparrow \text{)}$$

$$n_2 = 1; E_2 = E \text{ (spin } \downarrow \text{)}$$

$$n_3 = 2; E_3 = 2E \text{ (spiny } \uparrow \text{ i } \downarrow \text{)}$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \cdot$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Poziomy domieszkowe/defektowe

stosunek prawdopodobieństw znalezienia domieszki/defektu z $n+1$ elektronami i z n elektronami:

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{N_{n+1}}{N_n} = \frac{\sum_{j: n_j = n+1} e^{-\beta[E_j - (n+1)\mu]}}{\sum_{k: n_k = n} e^{-\beta[E_k - n\mu]}} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \cdot e^{-\beta[(E_{n+1} - E_n) - \mu]}$$

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{N_{n+1}}{N_n} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \cdot e^{-\beta[E^{n+1/n} - \mu]}$$

$$\sum_n N_n = N$$

zapełnianie kolejnych
poziomów domieszkowych
przy podnoszeniu poziomu
Fermiego

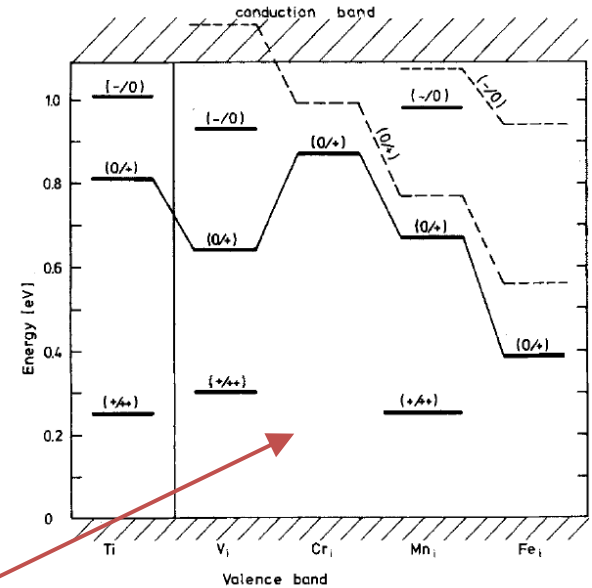


Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

N – koncentracja domieszek

E_{n+1} i E_n – **najniższe** spośród wszystkich energii E_j podukładu odpowiednio z $n+1$ i n elektronami

Obsadzenie poziomów domieszkowych

$E^{n+1/n}$ – tzw. *energia poziomu domieszkowego/defektowego* „numerowana”
liczbami obsadzających go elektronów (stanami ładunkowymi) $n+1$ i n

g_{n+1} i g_n – tzw. *degeneracje stanów podukładu z $n+1$ i n elektronami*

Degeneracje g_{n+1} i g_n uwzględniają możliwość występowania wielu różnych stanów podukładu odpowiadających tej samej liczbie cząstek (w tym stanów wzbudzonych):

$$g_n = \alpha_{n,0} + \sum_{i=1,2,\dots} \alpha_{n,i} e^{-\beta \varepsilon_{n,i}}$$

$\alpha_{n,0}$ i $\alpha_{n,i}$ są degeneracjami odpowiednio stanu podstawowego podukładu z n elektronami oraz stanów wzbudzonych z energiami wyższymi od stanu podstawowego o $\varepsilon_{n,i}$ (energie wzbudzeń)

Tak definiowane degeneracje g_n na ogół zależą od temperatury

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład – prosty donor (pomijamy stany wzbudzone):

- stan ładunkowy (+) realizowany na 1 sposób: $g_+ = 1$
- stan ładunkowy (0) realizowany na 2 sposoby (spin $\uparrow$ lub $\downarrow$): $g_0 = 2$
- energia poziomu donorowego $E^{0/+} = E_d$
- koncentracja donorów N_d

$$\frac{p_0}{p_+} = \frac{g_0}{g_+} \cdot e^{-\beta(E_d - \mu)} \quad p_+ + p_0 = 1$$
$$\Downarrow$$

$$p_0 = \langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{g_+}{g_0} \cdot e^{\beta(E_d - \mu)}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta(E_d - \mu)}}$$

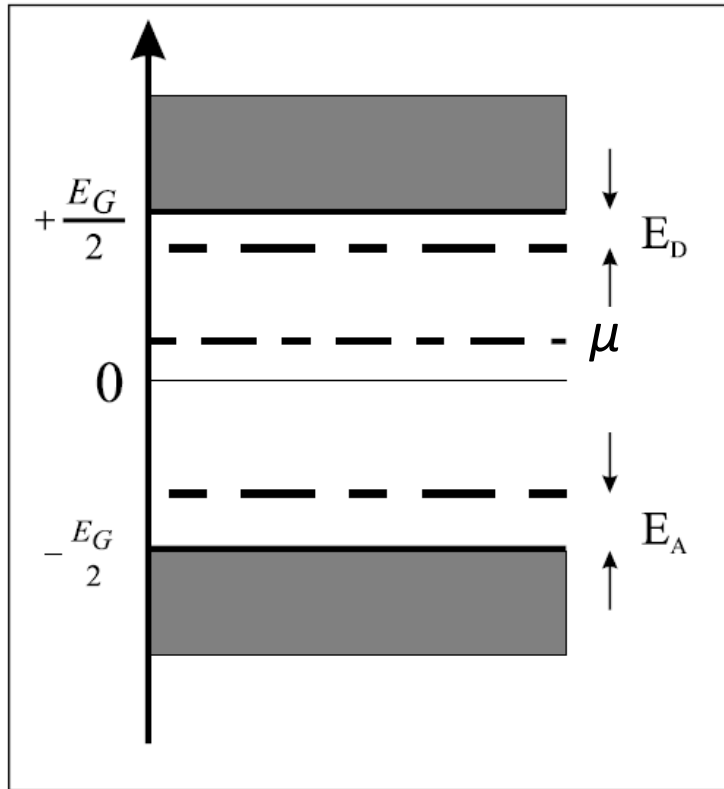
***prawdopodobieństwo
obsadzenia stanu
donorowego***

$$n_d = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta(E_d - \mu)}}$$

***koncentracja obsadzonych donorów
(donorów neutralnych)***

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności kryształu – przykład: koncentracja nośników w niezdegenerowanym półprzewodniku niesamoistnym



N_D – koncentracja donorów

N_A – koncentracja akceptorów

N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów

N_A^0 – koncentracja neutralnych akceptorów

n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

p – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

***Równanie neutralności kryształu
(bilans ładunków ujemnych i dodatnich):***

$$n + (N_A - N_A^0) = p + (N_D - N_D^0)$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

- Jeśli zarówno donory jak i akceptory są płytkie, a gaz elektronowy i dziurowy nie jest zdegenerowany, to:

$$E_D - \mu \gg kT \quad \mu - E_A \gg kT$$

$$N_D^0 \ll N_D \quad N_A^0 \ll N_A$$

– **praktycznie wszystkie domieszki są zjonizowane**

$$\begin{cases} \Delta n = n - p \approx N_D - N_A \\ n \cdot p = n_s^2 \end{cases} \Rightarrow$$

$$n = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_s^2} + \Delta n \right\}$$

$$p = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_s^2} - \Delta n \right\}$$

- Jeśli $\Delta n > 0$ (półprzewodnik typu n – dla typu p rozważania są symetryczne) i $\Delta n \gg n_s$, (w T=300K: $n_s(\text{Ge}) < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $n_s(\text{Si}) < 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $n_s(\text{GaAs}) < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$):

$$n \approx N_D - N_A$$

$$p \approx \frac{n_s^2}{N_D - N_A} = \frac{N_C(T) \cdot N_V(T)}{N_D - N_A} \cdot e^{-\frac{E_G}{kT}}$$

koncentracja nośników większościowych określona przez efektywną koncentrację domieszek, koncentracja nośników mniejszościowych może być bardzo mała (przykład – Si)

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Pojęcie kompensacji

- półprzewodniki kompensowane – zawierające zarówno donory jak i akceptory
- w odpowiednio wysokich temperaturach koncentracja nośników większościowych dana przez efektywną koncentrację domieszek $|N_D - N_A|$
- koncentracja centrów rozpraszających (ładunków): $N_D + N_A$
- współczynnik kompensacji – stosunek koncentracji domieszek mniejszościowych do większościowych:

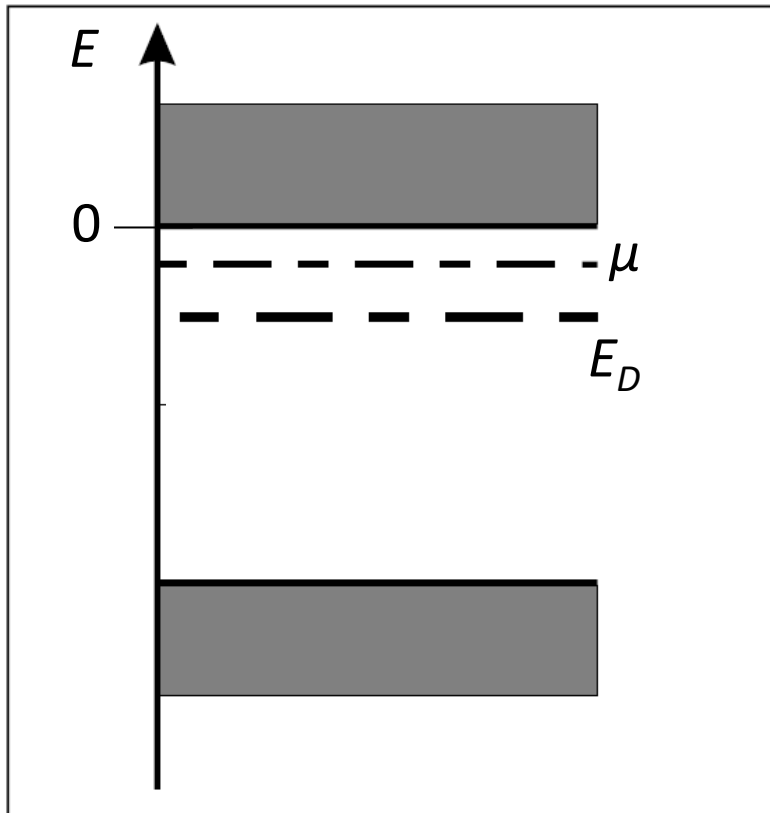
$$k = \frac{N_A}{N_D} \quad \text{– dla typu } n$$

$$k = \frac{N_D}{N_A} \quad \text{– dla typu } p$$

- w półprzewodnikach ***silnie kompensowanych*** ($k \approx 1$) silne ***fluktuacje potencjału elektrostatycznego*** pochodzącego od domieszek, ***lokalizacja związana z nieporządkiem, efekty perkolacyjne***

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności kryształu – niska temperatura, obszar jonizacji termicznej domieszek



N_D – koncentracja donorów

$N_A \approx 0$ – koncentracja akceptorów

N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów

n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

$p \approx 0$ – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Równanie neutralności:

$$n = (N_D - N_D^0)$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

- teraz znaczna część donorów będzie neutralnych (energie liczone od dna pasma przewodnictwa):

$$N_D - N_D^0 = N_D - \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\frac{E_D}{kT} - \frac{\mu}{kT}}} = \frac{N_D}{1 + 2 \cdot e^{-\frac{E_D}{kT} + \frac{\mu}{kT}}} \approx \frac{N_D}{2} \cdot e^{\frac{E_D}{kT} - \frac{\mu}{kT}}$$

- do obliczenia obsadzenia pasma przewodnictwa możemy użyć rozkładu Boltzmanna:

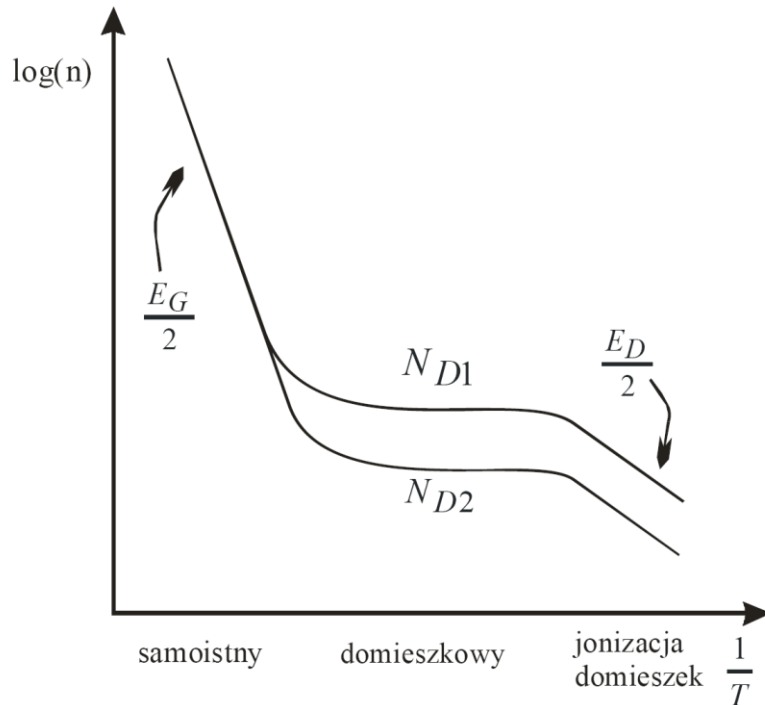
$$n = 2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = N_C(T) \cdot e^{\frac{\mu}{kT}}$$

co wobec $n = N_D - N_D^0$ daje:

$$\mu = \frac{E_D}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_D}{2N_C(T)} \right) \quad - \text{dla } T \rightarrow 0 \quad \mu \approx E_D/2 \quad (E_D < 0 !!!)$$

$$n(T) = \sqrt{\frac{N_C(T) \cdot N_D}{2}} \cdot e^{\frac{E_D}{2kT}} \quad - \text{nachylenie zależności } \ln(n) \text{ vs } 1/T \text{ daje } E_D/2$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

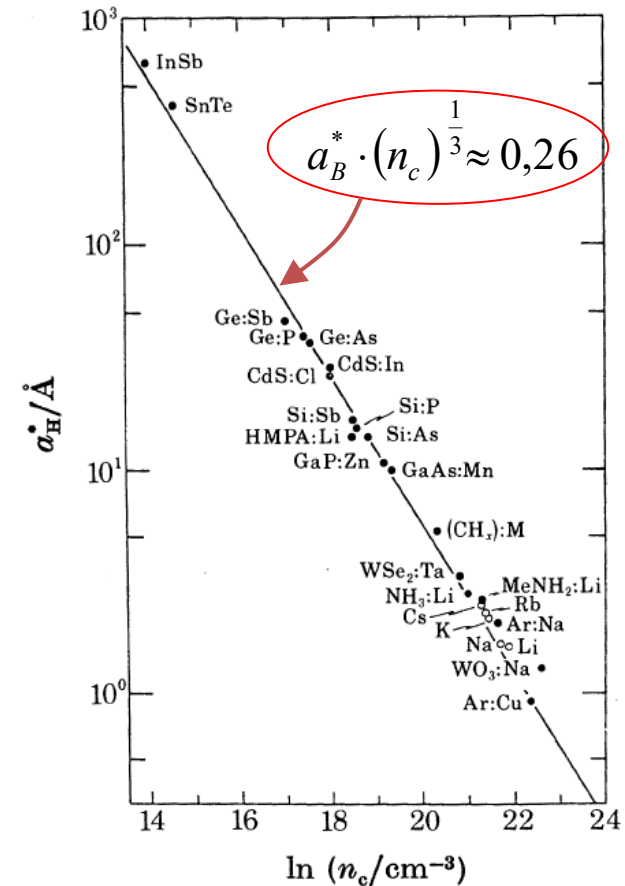
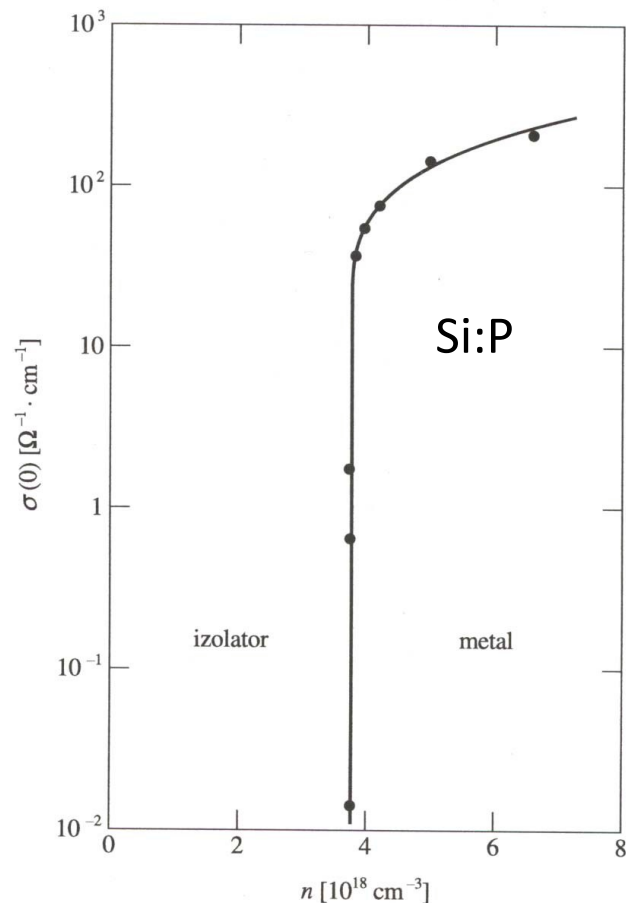


- dla półprzewodników skompensowanych w niskich temperaturach energia aktywacji termicznej wynosi E_D , a nie $E_D/2$
- jeśli domieszek jest dużo, tak, że funkcje falowe związanych na nich elektronów się przekrywają – energie jonizacji maleją, tworzą się pasma domieszkowe
- przy koncentracjach domieszek rzędu:

$$a_B^* \cdot (N_D)^{\frac{1}{3}} \approx 0,26$$

zachodzi **przejście fazowe niemetal-metal (tzw. przejście Motta)**

Obsadzenie poziomów domieszkowych



P.P. Edwards, M.J. Sienko, *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 2967 (1981)

PŁYTKIE STANY DOMIESZKOWE W PÓŁPRZEWODNIKACH

Przybliżenie masy efektywnej

Przykład – pasmo sferyczne, paraboliczne, z minimum w $\vec{k} = 0$:

$$E(\vec{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

proceedzi do równania:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} (-i\nabla)^2 + U(\vec{r}) \right) \Phi_n(\vec{r}) = [E - E_n(0)] \Phi_n(\vec{r})$$

i w konsekwencji:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\vec{r}) \right) \Phi_n(\vec{r}) = [E - E_n(0)] \Phi_n(\vec{r})$$

jest to, formalnie rzecz biorąc, równanie Schrödingera dla kwazicząstki o masie równej masie efektywnej m^* poruszającej się w potencjale $U(\vec{r})$. Potencjał periodyczny sieci jest uwzględniony poprzez masę efektywną.

Jeśli np. $U(\vec{r})$ jest przyciągającym potencjałem domieszki, to envelope będzie funkcją zlokalizowaną

Donor stowarzyszony ze sferycznym pasmem z punktu Γ

Stan donorowy stowarzyszony ze sferycznym pasmem przewodnictwa z minimum w punkcie Γ :

- Atom domieszki o wartościowości o jeden większej niż atom podstawiany – np. Si_{Ga} w GaAs
- Potencjał domieszki – głównie kulombowski ekranowany statyczną stałą dielektryczną ϵ_s :
$$U(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r}$$
- Część krótkozasięgową potencjału zaniedbujemy (przynajmniej na razie)
- Równanie masy efektywnej na funkcję envelopes $\Phi(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r} \right) \Phi(\vec{r}) = [E - E_c(0)] \Phi(\vec{r})$$

gdzie $E_c(0)$ jest energią minimum pasma przewodnictwa

Donor stowarzyszony ze sferycznym pasmem z punktu Γ

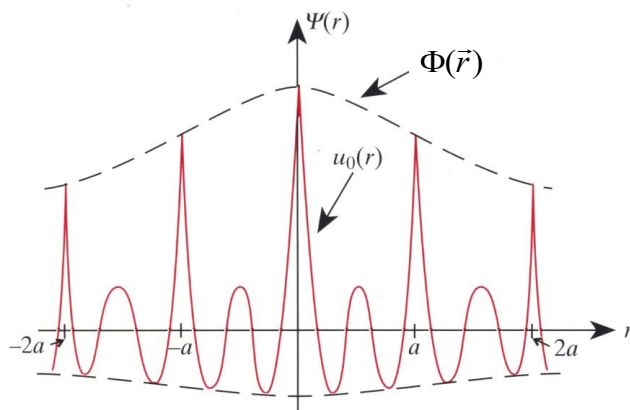
- Rozwiązanie jak dla „przeskalowanego” atomu wodoru.
Energie stanów związanych:

$$E_n = -Ry^* \cdot \frac{1}{n^2} \quad Ry^* = Ry \cdot \frac{1}{\epsilon_s^2} \left(\frac{m^*}{m_e} \right)$$

np. dla GaAs: $m^* = 0,067 m_e$, $\epsilon_s = 12,6 \Rightarrow Ry^* \approx 5,7 \text{ meV}$ – energia jonizacji donora *względem dna pasma przewodnictwa*

efektywny promień Bohra: $a_B^* = a_B \cdot \epsilon_s \left(\frac{m_e}{m^*} \right)$

co dla GaAs daje $a_B^* \approx 100 \text{ \AA}$, co stanowi około 20 stałych sieci GaAs



- Pełna funkcja falowa:
 $\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r}) \cdot u_0(\vec{r})$ – nieruchoma paczka falowa zbudowana ze stanów z okolicy $k=0$

$\Phi(\vec{r})$ – wolnozmienna envelopes

$u_0(\vec{r})$ – szybkozmienna funkcja Blocha

Donor stowarzyszony z bocznym minimum

Stan donorowy stowarzyszony z bocznym minimum pasma przewodnictwa:

- Powierzchnie stałej energii – elipsoidy obrotowe z minimum w $\vec{k}_0$:

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{k}_\perp + \vec{k}_\parallel \quad E(\vec{k}) = E_c(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_{1\perp}^2}{m_\perp^*} + \frac{k_{2\perp}^2}{m_\perp^*} + \frac{k_\parallel^2}{m_\parallel^*} \right)$$

- Równanie masy efektywnej:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_\perp^*} \frac{\partial^2}{\partial x_{1\perp}^2} + \frac{1}{m_\perp^*} \frac{\partial^2}{\partial x_{2\perp}^2} + \frac{1}{m_\parallel^*} \frac{\partial^2}{\partial x_\parallel^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r} \right] \Phi(\vec{r}) = [E - E_c(\vec{k}_0)] \Phi(\vec{r})$$

Symetria hamiltonianu – walcowa $\Rightarrow$ będzie częściowo zniesiona degeneracja stanów wodoropodobnych !!!

- Jeśli np. chcemy znaleźć stan podstawowy, możemy zastosować metodę wariacyjną z funkcją próbną postaci:

$$\Phi(x, y, z) = (\pi a^2 b)^{-\frac{1}{2}} \cdot \exp \left[- \left(\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$$

W. Kohn, J.M. Luttinger, *Physical Review* **98**, 915 (1955)

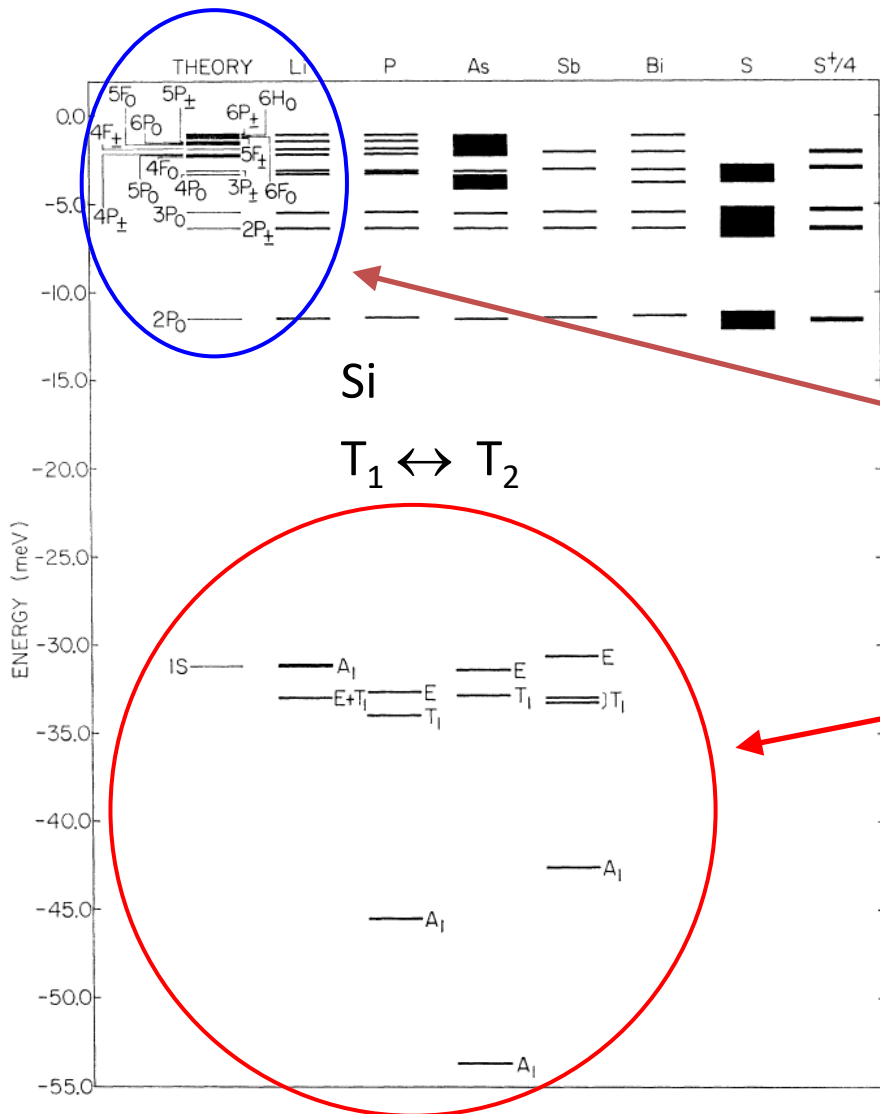
Donor stowarzyszony ze sferycznym pasmem z punktu Γ

- Wolnozmienna envelope $\Rightarrow$ paczka falowa zrobiona z funkcji Blocha z *małego* obszaru wokół $\vec{k} = 0$ (stan „zlokalizowany” w przestrzeni $\mathbf{k}$)
- Równanie masy efektywnej dopuszcza rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimami pasma przewodnictwa (!!!) – *pod każdym z bocznych minimów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne*, które należy traktować jak stany wzbudzone.
- Część krótkozasięgowa potencjału domieszki V_{cc} wprowadza poprawkę do energii stanów (*„central cell corrections”*), zależną od atomu domieszki (tzw. przesunięcie chemiczne, *„chemical shift”*), istotną tylko dla wodoropodobnych stanów typu s:

$$\Delta E \approx \langle \Psi^* | V_{cc} | \Psi \rangle$$

- Potencjalnie możliwe związanie dodatkowego elektronu: D^- (powinowactwo elektronowe wodoru $E_{ea} = 0,75 \text{ eV} \approx 0,055 \text{ Ry}$)

Donor stowarzyszony z bocznym minimum



wyniki rachunków wariacyjnych **dla krzemu** – R.A. Faulkner, *Physical Review* **184**, 713 (1969) w porównaniu z danymi doświadczalnymi:

- stany wzbudzone – zupełnie nieźle
- stan podstawowy – kiepsko; *rachunek w ogóle nie przewiduje rozszczepienia stanu podstawowego!*



Donor stowarzyszony z bocznym minimum

- minimów jest 6 (a więc można byłoby oczekiwać 6-krotnej degeneracji, ale to w kryształach niemożliwe !)
- potencjał krótkozasięgowy sprzęga stany pod różnymi dolinami
- rozszczepienie (tzw. valley-orbit splitting), 6-krotna degeneracja zniesiona (1+2+3) + przesunięcie chemiczne
- funkcje falowe są odpowiedniami (reprezentacje nieprzywiedlne grupy T_d : A_1, A_2, E, T_1, T_2) kombinacjami funkcji z różnych dolin
- podobna sytuacja w innych półprzewodnikach z minimum pasma przewodnictwa poza punktem Γ (np. Ge, GaP ...)

Akceptory w półprzewodnikach o strukturze diamentu i blendy cynkowej

Akceptory w półprzewodnikach o strukturze diamentu i blendy cynkowej

znacznie bardziej skomplikowana sytuacja:

- degeneracja pasm w punkcie Γ
- pofałdowanie powierzchni izoenergetycznych („warping”)



nie da się wprowadzić prostego tensora masy efektywnej dla pasm walencyjnych, nie da się zastosować przybliżenia masy efektywnej w najprostszej postaci...

Literatura:

W. Kohn, D. Schechter, *Physical Review* **99**, 1903 (1955)

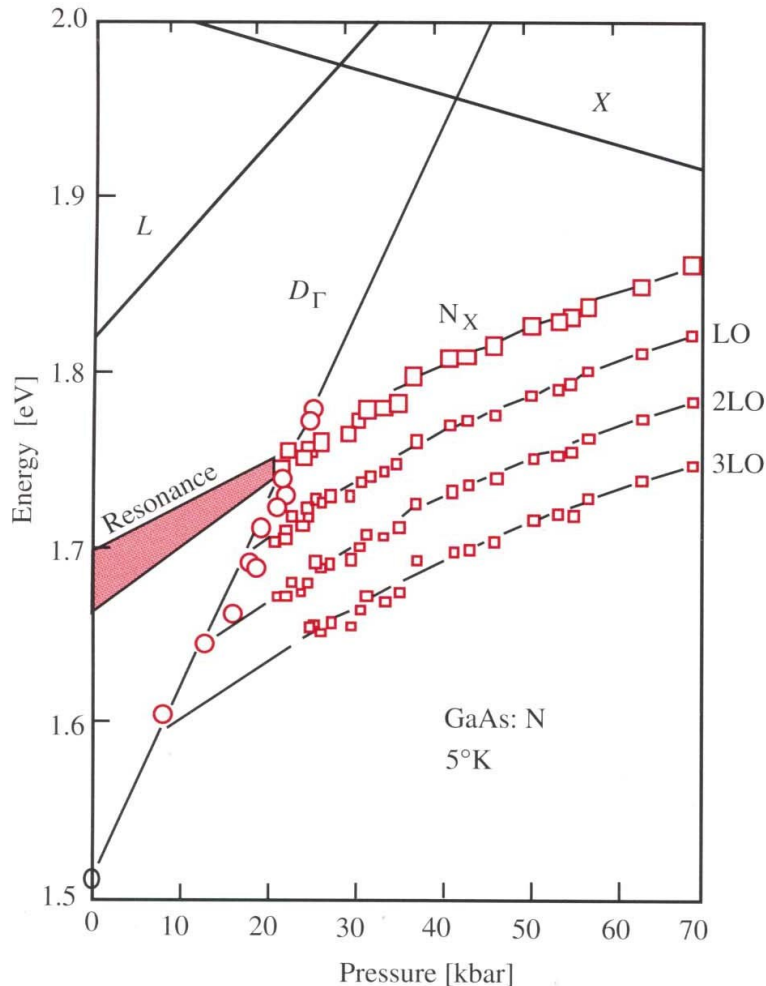
A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Physical Review B* **8**, 2697 (1973)

A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Physical Review B* **9**, 1527 (1974)

GŁĘBOKIE STANY DOMIESZKOWE

Głębokie stany domieszkowe

1. Funkcja falowa elektronu (elektronów) ***silnie zlokalizowana***, nie da się jej utworzyć jako kombinacji liniowej funkcji Blocha z niewielkiego obszaru strefy Brillouina:



- trzeba brać całą SB i wiele pasm,
- nie można mówić o stanach „stowarzyszonych” z jakimkolwiek ekstremum pasma,
- w funkcji czynników zewnętrznych wpływających na strukturę pasmową (np. ciśnienie hydrostatyczne, mieszanie kryształów) energie tych stanów nie śledzą żadnego ekstremum, a raczej podążają za środkiem ciężkości pasma

D.J. Wolford et al., in *Physics of Semiconductors 1984*, ed. J.D. Chadi, W.A. Harrison, p. 627

Głębokie stany domieszkowe

2. Nie ma prostych, uniwersalnych metod opisu
3. Możliwe *różne stany ładunkowe* centrum domieszkowego/defektu (przykład – metale przejściowe 3d)

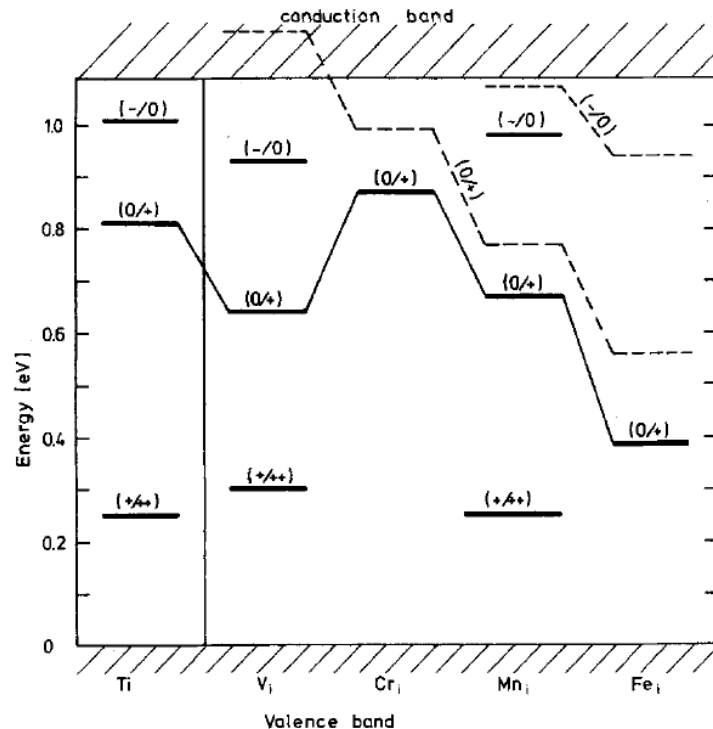


Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

Domieszki międzywęzłowe metali przejściowych (TM) w krzemie:

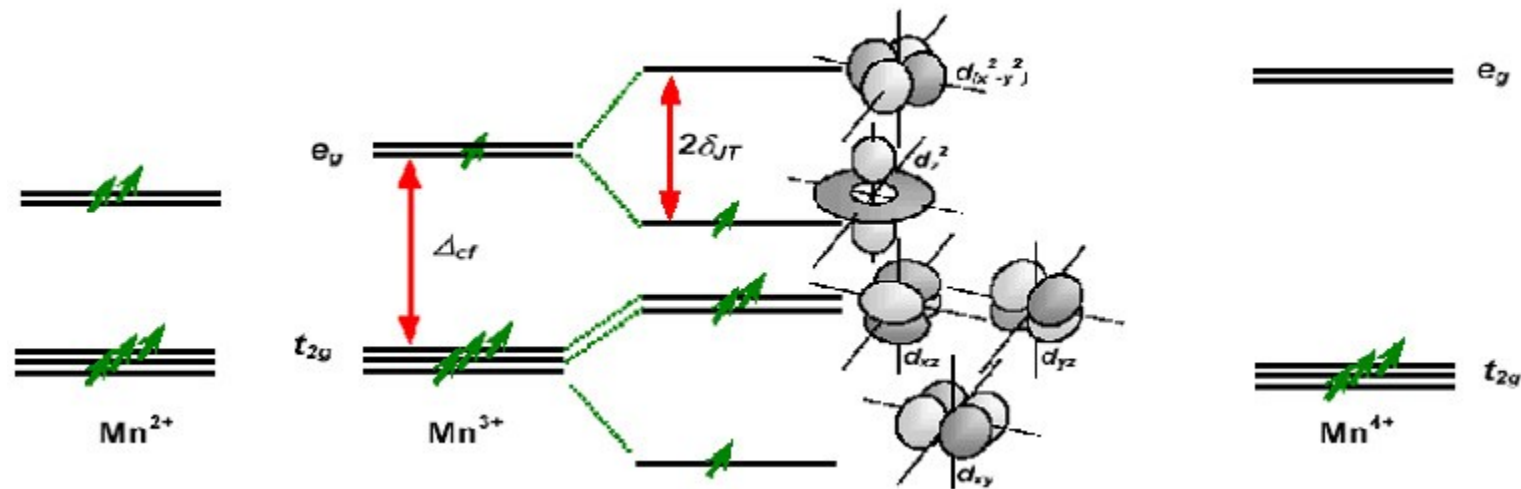
- poziomy akceptorowe i donorowe
- podobne energie poziomów dla różnych TMs

E. Weber, *Appl. Phys. A* **30**, 1 (1983)

Głębokie stany domieszkowe

4. Lokalna symetria defektu może wynikać z bilansu energii elektronowej i energii oddziaływania z ligandami (przykład – *efekt Jahn-Tellera*)

Encyclopedia Britannica: According to the Jahn-Teller theorem, any molecule or complex ion in an electronically degenerate state will be unstable relative to a configuration of lower symmetry in which the degeneracy is absent.



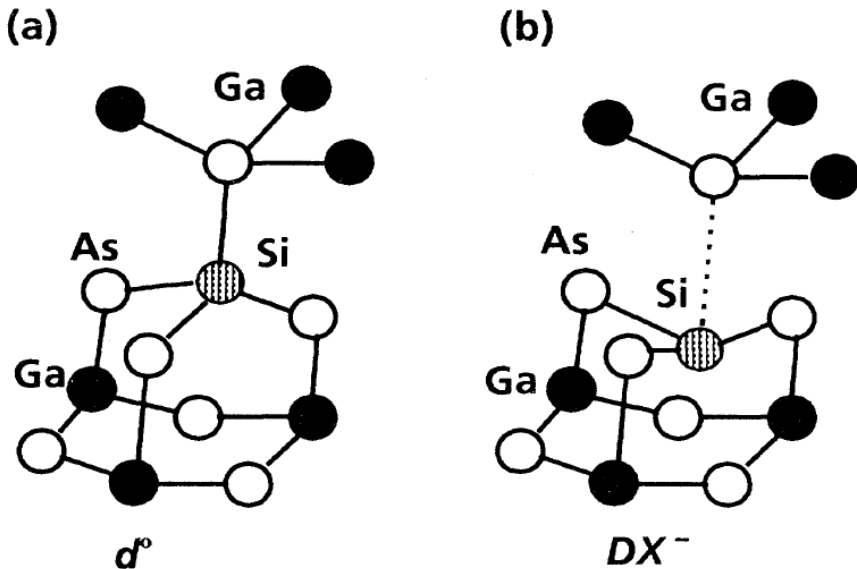
Mn²⁺: [Ar] 3d⁵

Mn³⁺: [Ar] 3d⁴

Mn⁴⁺: [Ar] 3d³

Głębokie stany domieszkowe

5. Silna lokalizacja prowadzi do *dużego oddziaływania z siecią krystaliczną*:



możliwa rekonfiguracja centrum przy zmianie jego stanu elektronowego (przykład – centra DX w związkach $A_{III}B_V$ i $A_{II}B_{VI}$, defekt EL2 w GaAs)

FIG. 2. Schematic views of the normal substitutional sites and the broken-bond configurations giving rise to the DX centers in Si-doped $Al_xGa_{1-x}As$ alloys

D.J. Chadi, K.J. Chang, *Phys. Rev. B* **39**, 10063 (1989)

Głębokie stany domieszkowe

- metastabilne obsadzenia defektów elektronami
- trwałe fotoprzewodnictwo
- duże różnice między optycznymi i termicznymi energiami jonizacji

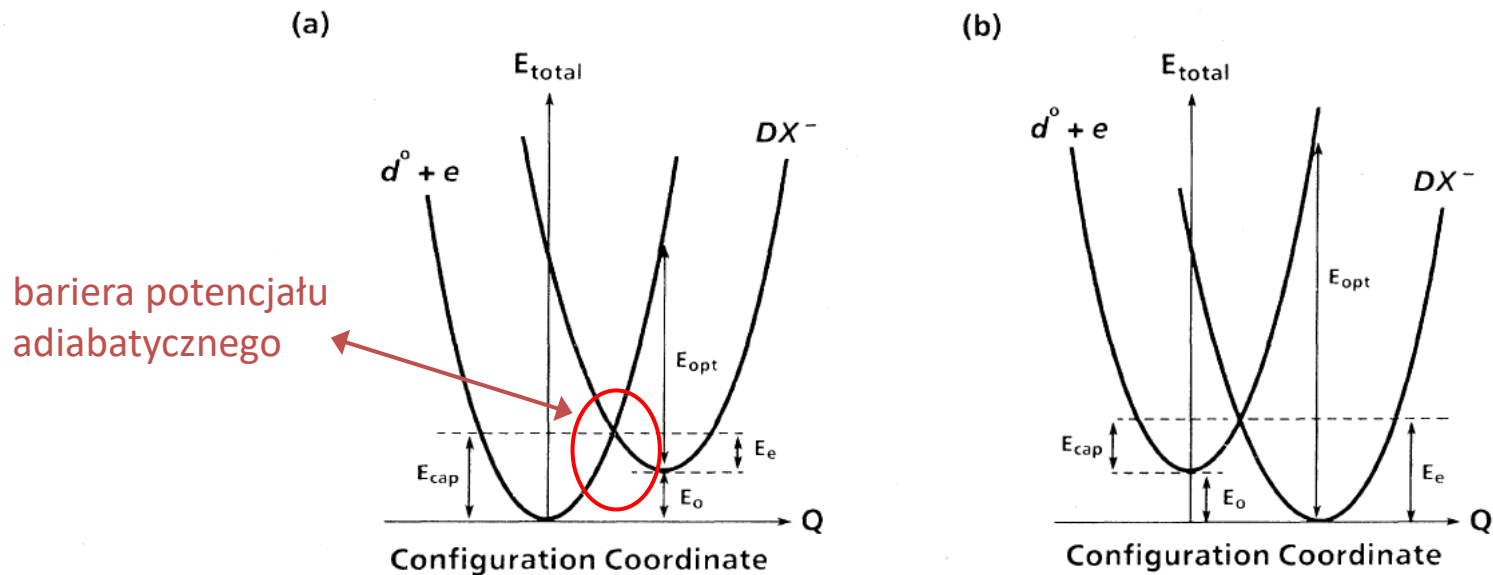


FIG. 1. Configuration-coordinate diagrams for DX centers in GaAs and typical $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloys are shown in (a) and (b), respectively. The DX center is a metastable resonance in GaAs and has a higher energy than a shallow donor state (d^0). For $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloys characterized by $x \geq 0.22$, DX centers are more stable than the shallow donors.

D.J. Chadi, K.J. Chang, *Phys. Rev. B* **39**, 10063 (1989)

Głębokie stany domieszkowe

6. Silne oddziaływanie z siecią może prowadzić do **ujemnej efektywnej wartości energii korelacji Hubbarda U** (tzw. „negative U ”) – ma to miejsce zarówno w przypadku centrów DX, jak i np. dla V_{Si} w Si, B_i w Si, Zn w Si

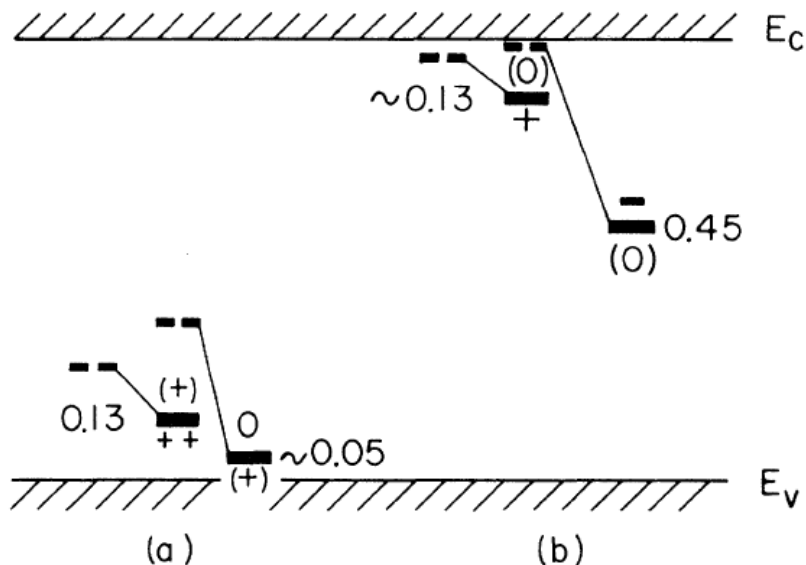


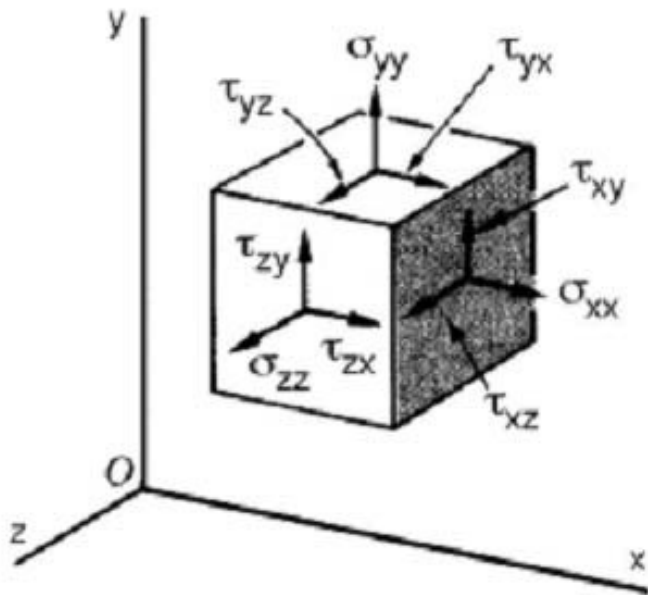
FIG. 1. (a) Suggested level positions for the isolated vacancy. Greater Jahn-Teller relaxation for the V^0 state causes a level inversion with the first donor state $(0/+)$ below the second $(+/++)$. (b) Suggested level positions for interstitial boron. Change of lattice configuration as the charge state changes from $B_i^+ \rightarrow B_i^0 \rightarrow B_i^-$ causes level inversion with the acceptor level $(-/0)$ below the donor $(0/+)$. The dashed lines indicate schematically the level positions before lattice readjustment. Level positions (in electronvolts) are denoted from the nearest band edge.

G.D. Watkins, J.R. Troxell, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 593 (1980)

Reakcje: $2V^+ \rightarrow V^0 + V^{++}$ i $2B_i^0 \rightarrow B_i^- + B_i^+$ prowadzą do obniżenia energii układów; przy podnoszeniu poziomu Fermiego względem energii poziomów defektowych defekty te od razu wyłapują po dwa elektrony

Własności sprężyste ciał stałych – tensor naprężeń

Tensor naprężeń σ_{ij}



- naprężenie – siła na jednostkę powierzchni
- symetryczny
⇓
- 3 naprężenia osiowe σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} ,
3 ścinania $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$, $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$, $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$
(lub $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$)
- dla ciśnienia hydrostatycznego:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix}$$

Własności sprężyste ciał stałych – tensor naprężeń

Notacja Voigta

$$\sigma_{ij} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$$

zastępujemy tensor
drugiego rzędu
wektorem

konwencja:

$11 \rightarrow 1; \quad 22 \rightarrow 2; \quad 33 \rightarrow 3; \quad 23 \rightarrow 4; \quad 13 \rightarrow 5; \quad 12 \rightarrow 6;$

Własności sprężyste ciał stałych – tensor naprężeń

Tensor odkształceń (deformacji) ε_{ij}

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

gdzie $\vec{u}$ – wektor przemieszczenia
wywołany deformacją

$$\varepsilon_{ij} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 1/2 \cdot \varepsilon_6 & 1/2 \cdot \varepsilon_5 \\ 1/2 \cdot \varepsilon_6 & \varepsilon_2 & 1/2 \cdot \varepsilon_4 \\ 1/2 \cdot \varepsilon_5 & 1/2 \cdot \varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix}$$

znowu zastępujemy
tensor drugiego rzędu
wektorem (*uwaga na 1/2
w definicji !*)

Własności sprężyste ciał stałych – liniowa teoria sprężystości

Liniowa teoria sprężystości (prawo Hooke'a)

- Tensory naprężeń i odkształceń są powiązane relacjami liniowymi (stosujemy konwencję sumowania po powtarzających się wskaźnikach):

$$\varepsilon_{kl} = S_{kl ij} \sigma_{ij} \quad \text{lub:} \quad \sigma_{kl} = C_{kl ij} \varepsilon_{ij}$$

gdzie $S_{kl ij}$ i $C_{kl ij}$ są tensorami 4 rzędu – odpowiednio: tensor podatności sprężystej i tensor sztywności sprężystej (tensor modułów sprężystości)

- Ponieważ σ_{ij} i ε_{ij} są symetryczne, to: $C_{kl ij} = C_{lk ij} = C_{kl ji}$ (podobnie dla $S_{kl ij}$)
- Żądanie jednoznaczności gęstości energii sprężystej:

$$u = \frac{1}{2} C_{kl ij} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij}$$

proceeds to: $C_{kl ij} = C_{ij kl}$



$C_{kl ij}$ i $S_{kl ij}$ mają co najwyżej po 21 niezależnych współczynników

Własności sprężyste ciał stałych – macierze sprężystości

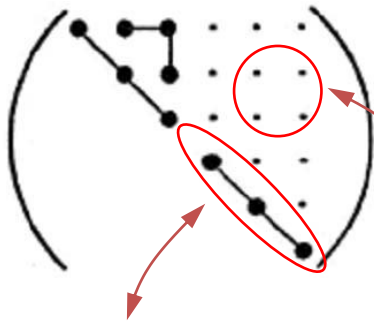
- Stosując konsekwentnie notację Voigta otrzymujemy:

$$\varepsilon_i = S_{ij} \sigma_j \qquad \sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j$$

gdzie σ_i i ε_i są 6-wymiarowymi wektorami odpowiednio naprężeń i odkształceń, zaś S_{ij} i C_{ij} są macierzami 6x6 odpowiednio współczynników podatności sprężystej i modułów sprężystości (współczynników sztywności)

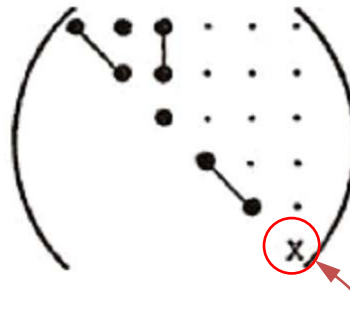
- Macierze sprężystości S_{ij} i C_{ij} :

struktura kubiczna (3)



współczynniki jednakowe

struktura heksagonalna (5)



równe odpowiednio $2(S_{11}-S_{12})$ lub $\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$

ciało izotropowe (2)

