

Это — хорошо известное соотношение между электронной и дырочной концентрациями в невырожденных полупроводниках. В рамках статистики зонной модели оно получается путем исключения μ из (2.49).

На этих примерах можно видеть преимущества и недостатки обоих методов. Кинетика реакций свободна от предположения о фиксированных энергетических уровнях дефектов и их концентрациях. С другой стороны, статистика зонной модели позволяет точно вычислить стандартные концентрации. Более того, она не ограничена малыми концентрациями электронов.

С примерами применения кинетики реакции мы встретимся также в следующем параграфе.

§ 18. Равновесие неупорядоченности

Два типа неупорядоченности решетки: «вакансии» и «дефекты внедрения» коренным образом отличаются от примесных атомов тем, что последние, в идеальном случае, могут быть полностью удалены из кристалла. Неупорядоченность решетки, напротив, является неизбежной. При заданной температуре устанавливается отчетливое равновесие между этими типами дефектов структуры кристалла.

Образование такого типа неупорядоченности решетки, — например, удаление атома решетки из занимаемого им узла кристаллической решетки и его внедрение в какое-нибудь междоузлие — требует энергии. Но с увеличением энергии кристалла увеличивается и энтропия. Свободная энергия, которая определяет условие равновесия при заданном объеме и температуре, также изменяется.

Прежде всего определяем равновесные концентрации для простейшего случая. Рассматриваем одноатомную решетку: пусть температура и объем постоянны, а вакансии и дефекты внедрения настолько удалены друг от друга, что их можно рассматривать как независимые. Кристалл может иметь N узлов решетки и N' местоположений, где могут быть размещены внедренные в междоузлия атомы.

При так называемой *неупорядоченности по Френкелю* атомы решетки размещены в междоузлиях. Пусть число пар вакансии — дефект внедрения будет n . Дефекты внедрения могут быть упорядочены $N'!/ (N' - n)! n!$ различными способами, а вакансии — $N! / (N - n)! n!$ различными способами. Это дает увеличение энтропии

$$S_n = k_B \ln \left[\frac{N!}{(N - n)! n!} \frac{N'!}{(N' - n)! n!} \right]. \quad (2.54)$$

Энергия образования n пар вакансии — дефект внедрения есть