

Mamadaliyeva Munojatxon Shuxrat qizi

Andijon davlat universiteti magistranti

Madaminov Xurshidjon Muxamedovich

Andijon davlat universiteti dotsenti

Tel: 99-900-36-27, e-mail: munojatmamadaliyeva15@gmail.com

UDK 621.315.592.3

YARIMO‘TKAZGICHLARDA VAKANSIYALAR HOSIL BO‘LISH ENERGIYASINI ANIQLASH

Annotatsiya. Bir qator binar yarimo‘tkazgichlarda vakansiyalar hosil bo‘lish entalpiyasi (h_s)ni hisoblashda, vakansiyalar bilan birga tugunlararo atomlar, konsentratsiyasi yetarlicha yuqori bo‘lgan komplekslar ta’sirini ham e’tiborga olish zarurligi aniqladi.

Kalit so'zlar: o‘zaro ta’sir potentsiali, Shottki nuqsoni, vakansiya, entalpiya, Debay harorati.

Мамадалиева Муножатхан Шухрат кизи

Андижанский государственный университет, магистрант

Мадаминов Хуршиджон Мухамедович

Андижанский государственный университет, доцент

Тел: 99- 900-36-27, e-mail: munojatmamadaliyeva15@gmail.com

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ВАКАНСИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Аннотация. При расчете энтальпии образования вакансий (h_s) в ряде бинарных полупроводников установлено, что наряду с вакансиями необходимо учитывать влияние межузловых атомов и комплексов с достаточно высокой концентрацией.

Ключевые слова: потенциал взаимодействия, дефект Шоттки, вакансии, энтальпия, температура Дебая.

Mamadaliyeva Munojatkhon Shukhrat kizi
Andijan State University, master degree student
Madaminov Khurshidjon Mukhamedovich
Andijan State University, Associate Professor
Phone: 99- 900-36-27, e-mail: munojatmamadaliyeva15@gmail.com

DETERMINATION OF THE ENERGY OF VACANCY FORMATION IN SEMICONDUCTORS

Abstract: When calculating the enthalpy of vacancy formation (h_s) in a number of binary semiconductors, it was found that, along with vacancies, it is necessary to take into account the influence of interstitial atoms and complexes with a sufficiently high concentration.

Keywords: interaction potential, Schottky defect, vacancy, enthalpy, Debye temperature.

Kirish

Dunyoning yetakchi ilmiy markazlarida yarimo‘tkazgichlarda nuqson hosil bo‘lish jarayonlarini boshqarishni modellashtirishga asoslangan “nuqson muhandisligi” (defect ingeneering) deb ataluvchi yangi yo‘nalish jadal rivojlanmoqda. Mazkur yo‘nalishning eng muhim masalalardan biri bo‘lgan yarimo‘tkazgichlarda vakansiyalar hosil bo‘lishining entalpiyasini aniqlash masalasi dolzarb hisoblanadi [1].

Zamonaviy texnologiyalarni takomillashtirishda vakansiyalar hosil bo‘lishining nazariy modellarini yanada rivojlantirish ko‘p vaqt talab qiluvchi va qimmat tajribalarni kompyuterda modellashtirish bilan almashtirish uchun ham,

nuqsonlarning o‘zaro ta’siriga asoslangan texnologik jarayonlarni optimallashtirish uchun ham muhimdir [2].

Adabiyotlar tahlili

Yarimo‘tkazgichlar fizikasi va yarimo‘tkazgichli elektronikaning ushbu masalasi yoritilgan tadqiqotlarning soni ko‘p emas [3-5], mavjudlarida ham yarimo‘tkazgichlardagi vakansiyalarning hosil bo‘lishi energiyasini aniqlash usullariga kam e’tibor berilgan.

Yarimo‘tkazgichdagi vakansiyalar muhim nuqtaviy nuqsonlar turiga mansub bo‘lib, ular kristall tarkibida mavjud bo‘ladi va uning termodinamik va elektr xususiyatlarini ma’lum darajada belgilaydi. Demak, vakansiyaning hosil bo‘lish entalpiyasi (h)ni aniqlash katta amaliy ahamiyatga ega [6].

Ko‘pchilik hollarda mazkur (h) kattalikni hisoblash EHMni qo‘llagan holda amalga oshiriladi. EHM sohasida yetarlicha yutuqlarga erishilganiga qaramay, nuqsonlar nazariyasidagi mazkur masala yechish murakkabligicha qolmoqda. Mavjud ilmiy adabiyotlarning tahliliga ko‘ra [4-5], juft o‘zaro ta’sir potensialini qo‘llagan holda, vakansiyalar hosil bo‘lish entalpiyasini hisoblash usuli ionli kristallar uchun qo‘llanilgan bo‘lib, o‘zining soddaligi va qulayligi bilan boshqa usullardan ustunligi bilan ajralib turar ekan. Ushbu ishda yuqorida qayd etilgan usul yordamida ionli bo‘lmagan yarimo‘tkazgich kristallarda vakansiyalar hosil bo‘lish entalpiyasini aniqlash maqsad qilib olindi.

Tadqiqot metodologiyasi

Shottki nuqsolarini hosil bo‘lish entalpiyasi [4] adabiyotga asosan,

$$h_s = E_s + \frac{\alpha_p T D a b}{3(b-a)} (K_s X^b - X^a) \quad (1)$$

$$E_s = \frac{D}{b-a} (a K_s X^b - b X^a) \quad (2)$$

$$K_s = 1 + \frac{5b(b+1)}{16} \quad (3)$$

$$X = \left(1 + \frac{\alpha_p T}{3}\right)^{-1} \quad (4)$$

ko'rinishida aniqlanadi, bu yerda α_p - issiqlikdan kengayish ko'effitsiyenti, D, a, b – kattaliklar yaqin qoshni atomlar bilan o'zaro ta'sirni ifodalovchi

$$W(r) = \frac{D}{b-a} \left[a \left(\frac{r_0}{r} \right)^b - b \left(\frac{r_0}{r} \right)^a \right] \quad (5)$$

Mi-Lenard-Jons juft o'zaro ta'sir potensialining parametrlari [4-5] hisoblanadi, bu yerda r_0 - kristallar uchun turli atomlar orasidagi eng kichik masofaga teng bo'lgan (5) potensial minimumining koordinatasi.

Mi-Lenard-Jons juft o'zaro ta'sir potensialining b parametri

$$b \approx 6\gamma - 2 \quad (6)$$

formula bilan aniqlanadi [4], bu yerda γ va θ – Gryunayzen parametri va Debay temperaturasi, mos ravishda. a parametrni aniqlashda esa quyida keltirilgan, bir-biridan farq qiluvchi kattaliklar to'plami orqali hisoblanuvchi uch xil [4, 5] ifodadan foydalanildi:

$$a = bG(K_R + G)^{-1} \quad (7)$$

Bu yerda

$$K_r = \frac{h^2}{4\pi^2 r_0^2 M}, \quad G = \frac{144}{5k_n} \frac{\theta_0}{b(b+1)} \frac{k\theta_0}{8D} \quad (8)$$

M - atom massasi, k_n - koordinatsion son;

$$a = \frac{3\pi r_0^2 B}{k_n k_y b D} \quad (9)$$

Bu yerda B - har tomonlama siqilish ko'effitsiyenti, k_y - tahlanish ko'effitsiyenti;

$$a = \frac{\mu+1}{\mu-1} \frac{6Mv_L^2}{k_n b D} \quad (10)$$

bu yerda μ – Puasson ko'effitsiyenti, v_L – tovush bo'ylama tezligi (1-jadvalga qarang).

1-jadval

$A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$ va $A^{IV}B^{VI}$ birikmalarining parametrlari [4-5, 8-11]

Parametr	ZnS	ZnTe	CdS	CdTe	GaAs	GaSb	PbS	PbTe
$\alpha, 10^{-6} K^{-1}$	6,14	6,5	8,5	4,9	5,9		20,3	19,8
μ	0,38 334±6	0,36 250 ²	0,40 250 ¹	0,41 161±4	0,31 275 ¹	0,31	0,19 149 ¹	0,67 127 ¹
θ		258,7	300	220	355	250	227 ³	125 ³

		θ_{LO}	434,8	θ_{LO}	480	336		
	0,21				0,52		2,52	1,96
	γ_{TA}							
	1,33						250	2,18
	γ_{TA}							
γ	2,33 ⁴	2,19 ⁴	2,53 ⁴	2,54 ⁴	1,87 ⁴	1,89 ⁴	1,04 ⁴	0,27 ⁴
	2,41 ⁵	2,22 ⁵	2,63 ⁵	2,74 ⁵	1,83 ⁵	1,83 ⁵	1,24 ⁵	1,94 ⁶

Tahlil va natijalar

Bir qator yarimo'tkazgich birikmalar uchun vakansiya hosil bo'lish entalpiyasi yuqorida keltrib o'tilgan usul yordamida hisoblandi. Hisoblash natijalari 2-jadvalda keltirilgan.

2-jadval

$A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$ va $A^{IV}B^{VI}$ birikmalarida Shottki nuqsonlari hosil bo'lish entalpiyasi

Yarimo'tkazgich nomi	$h_s + D, eV$								
	T=0 K da			T=300 K da			adabiyot natijalari		
	(7)	(9)	(10)	(7)	(9)	(10)	[8]	[9]	[10]
ZnS	8,49	9,84		8,86	9,7		13,13	9,98	
ZnTe	8,67			9,01	7,54	8,27	8,03		
CdS	7,86			9,45	9,03		10,35		9,22
CdTe	6,16		7,86	8,82	7,21	7,66	6,96	5,91	9,00
GaAs	8,99			11,72	11,03		9,90	10,10	8,50
GaSb				9,69	9,98		9,16		
PbS	6,15	5,93		7,83	6,10	6,16	9,24	7,35	
PbTe	5,36	4,86			4,86		4,42	4,322	

¹ Koeffitsiyentning T=0 K dagi qiymati, ² Koeffitsiyentning T=80 K dagi qiymati,

³ Koeffitsiyentning T=200 K dagi qiymati, ⁴ (11) ifoda asosida hisoblash natijasi,

⁵ (12) ifoda asosida hisoblash natijasi, ⁶ (14) ifoda asosida hisoblash natijasi.

Natijalarga ko'ra, qo'rg'oshin tellur va qo'rg'oshin sulfida vakansiyalar hosil bo'lish entalpiyasi qiymati eng kichik, galliy arsenid va galliy surmada esa ushbu qiymat eng katta ekanligini ko'rishimiz mumkin.

Parametr a ni hisoblashdagi qo'llanilgan (7) ifoda orqali olingan natijaga Debay harorati va Gryunayzen parametri qiymatini hisoblash usuli yetarlicha ta'sir ko'rsatadi. Bu haqda [8-11] ishlarda ham aytib o'tilgan.

Gryunayzen parametri γ ni hisoblash uchun qayishqoqlik doimiylari C_{ij} yoki Puasson koeffitsiyenti μ dan foydalangan holda hisoblash imkonini beruvchi [10] adabiyotda keltirilgan

$$\gamma = \frac{9(v_L^2 - \frac{4}{3}v_T^2)}{2\bar{v}^2}, \quad (11)$$

$$\gamma = \frac{3(1+\mu)}{2(2-3\mu)} \quad (12)$$

ifodalarni qo'llanildi. Bu yerda v_L va v_T - tovush tezligining bo'ylama va ko'ngdalang tashkil etuvchilari,

$$v_L = \left[\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho} \right]^{1/2}, \quad v_T = \left[\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho} \right]^{1/2} \quad (13)$$

bunda ρ - zichlik.

Xulosalar

Yuqorida keltirilganlarga qo'shimcha ravishda ishda olingan muhim xulosalar sifatida quyidagilar aniqlandi:

1. Binar yarimo'tkazgich $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$ va $A^{IV}B^{VI}$ birikmalar uchun Gryunayzen kattaligi (γ) qiymatlari hisoblandi;
2. Bir qator binar yarimo'tkazgich kristallarda vakansiyalar hosil bo'lish entalpiyasi qiymatlari hisoblandi, natijalar adabiyotlarda mavjud natijalar bilan qoniqarli mosligi aniqlandi;
3. Kristallarda vakansiyalar hosil bo'lish entalpiyasi qiymati $A^{IV}B^{VI}$ birikmalar uchun eng kichik qiymatga ega bo'lishi hamda, mazkur kattalikning qiymati $A^{II}B^{VI}$ kristallardan $A^{III}B^V$ kristallarga qarab o'sib borishi aniqlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Агафонова О.В., Бортников К.С. Влияние электронной подсистемы на кинетику и термодинамику образования комплексов из двух дефектов. Оптика, оптоэлектроника и технологии: Труды международной конференции. - Ульяновск: УлГУ, 2001, С. 8.
2. Булярский С.В. Фистуль. В.И. Термодинамика и кинетика взаимодействующих дефектов в полупроводниках. М.: Наука, 1997. С. 8.
3. Булярский СВ., Светухин В.В., Львов П. Е. Термодинамика комплексообразования и кластеризации дефектов. // ФТП, 2000, №4. С. 385-389.
4. Магомедов М.Н. Объем и энтропия образования дефекта Шоттки в ионном кристалле // ФТТ. - 1992. - Т. 34, № 12. С. 3718-3723.
5. Магомедов М.Н. Энтальпия образования дефекта Шоттки в ионном кристалле // ФТТ. – 1992. – Т. 34, № 12. – С. 3724 – 3729.
6. Mo'minova M., Mamadaliyeva M., Madaminov X.M. Binar yarimo'tkazgichlarda vakansiyalar hosil bo'lish entalpiyasi. "Zamonaviy fizika va astronomiyaning muammolari, yechimlari, o'qitish uslublari" mavzusida halqaro miqyosida ilmiy-amaliy anjuman materiallari, Toshkent, 2024, 16 aprel, 146-150 b.
7. Магомедов М.Н. Межатомный потенциал и уравнение состояния алмазоподобных полупроводников // ЖФХ. - 1989. - Т. 63, № 11. С. 2943.
8. Магомедов М.Н. О вычислении температуры Дебая и параметра Грюнайзена // ЖФХ. – 1987. – Т. 61, № 4. С. 1003-1009.
9. Горічок І.В.. Енергії утворення вакансій у кристалах A^2B^6 // Фізика і хімія твердого тіла. -2011, - Т. 12, № 2. С. 322-326.
10. Wei S.-H., Zhang S.B.. Chemical trends of defect formation and doping limit in II-VI semiconductors: The case of CdTe. Phys. Rev. B. 2002. **66**, 155 211.
11. Байков В.И., Исаев Э.И., Коржавый П.А., Векилов Ю.Х., Абрикосов И.А. Исследование “из первых принципов” энергетических характеристик и магнитных свойств точечных дефектов в GaAs // ФТТ. -2005. –Т. 47, № 12. – С. 1762.