

Suyuq fazali epitaksiya (LPE) usulida kremniy taglikda o'stirilgan epitaksial plyonkalar qalinligining eritma–erituvchi hajmiga bog'liqligini matematik modellashtirish

f.-m.f.d.prof. B. Sapaev, NamDTU mustaqil tadqiqotchisi Q.A. Yo'ldashev, NamDTU talabasi N.Y. Abdikarimov, NamDTU talabasi G.D. Roxataliyeva

Namangan Davlat Texnika Universiteti, Islom Karimov ko'cha 12 uy,

Namangan 160103, Uzbekiston

gmail: qodirjonyoldashev52@gmail.com

Annotatsiya

Ushbu maqolada suyuq fazali epitaksiya (LPE) usulida kremniy taglikda o'stirilgan epitaksial plyonkalar qalinligining eritma–erituvchi hajmiga bog'liqligi matematik jihatdan modellashtirilgan. Model massa saqlanish qonuni, eritmadagi Yuroqi to'yinganlik hodisasi hamda diffuziya bilan cheklangan o'sish mexanizmlariga asoslangan. Olingan analitik ifodalar epitaksial plyonka qalinligining eritma hajmiga chiziqli bog'liqligini ko'rsatadi. Nazariy natijalar Python dasturi yordamida grafik ko'rinishda tasvirlangan. Tadqiqot natijalari epitaksial texnologiyalarni optimallashtirishda amaliy ahamiyatga ega.

Kalit so'zlar: suyuq fazali epitaksiya, kremniy, epitaksial plyonka, yuroqi to'yinganlik, matematik model.

**Математическое моделирование зависимости толщины
эпитаксических пленок, растущих на кремниевой подложке методом
жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ), от объема раствор- расплава**

*Кандидат наук, профессор Б.Сапаев, независимый исследователь
НамДТУ; К.А.Йолдашев, студент НамДТУ; Н.Ю., студент НамДТУ;*

Г.Д.Рохаталия

Наманганский государственный технический университет, ул. Ислама

Каримова, 12, Наманган

160103, Узбекистан

gmail: qodirjonyoldashev52@gmail.com

Аннотация

В данной статье математически смоделирована зависимость толщины эпитаксиальных плёнок, выращенных на кремниевой подложке методом жидкофазной эпитаксии (LPE), от объёма раствора–расплава. Модель основана на законе сохранения массы, явлении пересыщения в растворе и механизме роста, ограниченного диффузией. Полученные аналитические выражения показывают линейную зависимость толщины эпитаксиальной плёнки от объёма раствора. Теоретические результаты представлены в графическом виде с использованием программного пакета Python. Результаты исследования имеют практическое значение для оптимизации эпитаксиальных технологий.

Ключевые слова: жидкофазная эпитаксия, кремний, эпитаксиальная пленка, пересыщение, математическая модель.

Mathematical modeling of the dependence of the thickness of epitaxial films growing on a silicon substrate by liquid phase epitaxy (lpe) method on the solvent–solvent volume

DC.Prof. B.Sapaev, independent researcher Q..Yudashev, student

N.Abdikarimov, student G.Rokhataliyeva

Namangan State Technical University, Islam Karimov Street 12,

Namangan 160103, Uzbekistan

gmail: qodirjonyoldashev52@gmail.com

Abstract

In this paper, the dependence of the thickness of epitaxial films grown on a silicon substrate by the liquid-phase epitaxy (LPE) method on the solution–solvent volume is mathematically modeled. The model is based on the law of mass conservation, the supersaturation phenomenon in the solution, and diffusion-limited growth mechanisms. The obtained analytical expressions demonstrate a linear dependence of the epitaxial film thickness on the solution volume. The theoretical

results are presented graphically using Python software. The research results are of practical importance for the optimization of epitaxial technologies.

Keywords: liquid phase epitaxy, silicon, epitaxial film, supersaturation, mathematical model.

1. Kirish

Yarimo'tkazgich texnologiyalarida yuqori sifatli epitaksial qatlamlar olish zamonaviy mikro- va nanoelektronikaning muhim vazifalaridan biridir. Suyuq fazali epitaksiya (LPE) usuli nisbatan past texnologik murakkabligi, yuqorisifatli kristall hamda qalin qatlamlar olish imkoniyati bilan ajralib turadi.

LPE jarayonida epitaksial plyonka xossalariga ta'sir etuvchi asosiy parametrlar qatoriga:

Harorat gradienti, sovitish tezligi, eritmadagi elementlar kremniy konsentratsiyasi, nafaqat kremniy konsentratsiyasi, diffuziya hodisasi, tortishish kuchi, eritma–erituvchi hajmi kiradi.

Amaliy tajribalar shuni ko'rsatadiki, eritma hajmining o'zgarishi epitaksial qatlam qalinligiga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Shu sababli mazkur ishda *epitaksial plyonka qalinligining eritma–erituvchi hajmiga bog'liqligini matematik modellashtirish* dolzarb hisoblanadi.

2. Materiallar va metodlar

2.1. LPE jarayonining fizik asoslari

LPE jarayonida kremniy metall erituvchi (Al, Ga, Sn va boshqalar) ichida yuqori haroratda eritiladi. Harorat pasaytirilganda eritma *Yuroqi to'yinganlikga(bu muhitda (eritma yoki bug' fazasida) moddaning muvozanat holatida mumkin bo'lgan miqdordan ortiqcha bo'lishi holati.)* uchraydi va ortiqcha kremniy atomlari kristall panjaraga ega bo'lgan kremniy taglik yuzasida epitaksial tarzda o'saboshlaydi Jarayonning asosiy bosqichlari:

1. Eritmada muvozanat konsentratsiyasining hosil bo'lishi;
2. Harorat pasayishi natijasida yuroqi to'yinganlik holatining yuzaga kelishi;

3. Si atomlarining diffuziyasi;
4. Taglik yuzasida kristallizatsiya jarayonining boshlanishi..

2.2. Model uchun qabul qilingan farazlar

Modelni soddalashtirish maqsadida quyidagi farazlar qabul qilindi:

- eritma bir jinsli;
- konveksiya e'tiborga olinmaydi;
- o'sish diffuziya bilan cheklanadi;
- epitaksiya yuzasi tekis va doimiy.

3. Nazariy model.

3.1. Eritmadagi kremniy miqdori

Eritmadagi kremniyning umumiy miqdori:

$$N_{Si} = C \cdot V \quad (1)$$

bu yerda C — eritmadagi kremniy konsentratsiyasi,
 V — eritma–erituvchi hajmi.

Harorat T dan $T - \Delta T$ ga pasayganda muvozanat konsentratsiyasi kamayadi:

$$\Delta C = C_{eq}(T) - C_{eq}(T - \Delta T) \quad (2)$$

Shu sababli eritmadan ajralib chiqadigan kremniy miqdori:

$$\Delta N = V \cdot \Delta C \quad (3)$$

3.2. Yuroqi to'yinganlik tushunchasi

Suyuq fazali epitaksiya jarayonida epitaksial o'sishning harakatlantiruvchi kuchi eritmaning Yuroqi to'yinganlik holatidir. Yuroqi to'yinganlik eritmadagi haqiqiy kremniy konsentratsiyasi bilan muvozanat konsentratsiyasi orasidagi nisbiy farq sifatida aniqlanadi:

$$\sigma = \frac{C - C_{eq}}{C_{eq}} \quad (4)$$

Bu yerda C — eritmadagi kremniyning real konsentratsiyasi, C_{eq} — berilgan haroratdagi muvozanat konsentratsiyasi.

Yuroqi to'yinganlik qiymati eritmaning termodinamik holatini tavsiflaydi. Agar: $\sigma=0$ bo'lsa, eritma muvozanat holatida bo'lib, kremniy atomlarining eritmada ajralishi hamda kristallanishi sodir bo'lmaydi. $\sigma>0$ holatda eritma yuroqi to'yinganliklangan bo'lib, ortiqcha kremniy atomlari energetik jihatdan barqaror bo'lmagan holatda bo'ladi va ular eritmada ajralib chiqishga intiladi. Natijada kremniy atomlari taglik yuzasiga diffuziyalanib, kristall panjaraga kirib taglik panjarasi bilan kimyoviy bog' hosil qila boshlaydi va epitaksial qatlam hosil bo'ladi. Aksincha $\sigma<0$ bo'lganda eritma to'yinmagan holatda bo'lib, mavjud epitaksial qatlamning yoki taglikning qisman erishi kuzatilishi mumkin.

Yuroqi to'yinganlik darajasi epitaksial o'sish tezligini belgilovchi asosiy parametr hisoblanadi. Kichik qiymatlarda ($\sigma \ll 1$) epitaksial o'sish sekin va yuqori kristall sifati bilan kechadi, katta yuroqi to'yinganlik qiymatlarida esa o'sish tezligi ortadi, biroq polikristall qatlam yuzaga kelish ehtimolligi ortadi. Shu sababli LPE jarayonida yuroqi to'yinganlik optimal qiymatlarda boshqarilishi zarur.

Mazkur ishda yuroqi to'yinganlik harorat pasayishi natijasida hosil bo'lishi hisobga olinib, epitaksial plyonka qalinligini aniqlovchi matematik modelga kiritildi va uning eritma–erituvchi hajmiga bog'liqligi tahlil qilindi.

3.3. Yuroqi to'yinganlikning haroratga bog'liqligi

Suyuq fazali epitaksiya jarayonida kremniyning eritmada muvozanat konsentratsiyasi *harorat funksiyasi* bo'lib, u termodinamik muvozanat sharti orqali aniqlanadi. Ko'pchilik metall–kremniy tizimlari uchun muvozanat konsentratsiyasi Arrenius tipidagi bog'lanish bilan ifodalanadi:

$$C_{eq}(T) = C_0 \exp\left(\frac{-\Delta H}{kT}\right) \quad (5)$$

bu yerda: C_0 — bu tizimga bog'liq oldingi koeffitsiyent bo'lib, u eritmada kremniy atomlarining maksimal mumkin bo'lgan konsentratsiyasini belgilay

ΔH — kremniyning erituvchidagi erish entalpiyasi,

k — Boltsman doimiysi,

T — mutlaq harorat.

Bu ifoda shuni ko'rsatadiki, *harorat kamayishi bilan $C_{eq}(T)$ keskin kamayadi*, ya'ni eritma muvozanatdan chiqadi.

3.3.1. Harorat pasayishi natijasida yuroqi to'yinganlikning hosil bo'lishi

Boshlang'ich holatda eritma T_0 haroratda muvozanatda bo'lsin:

$$C(T_0) = C_{eq}(T_0) \quad (6)$$

Harorat kichik qiymatga ΔT ga pasaytiriladi:

$$T = T_0 - \Delta T, \quad \Delta T \ll T_0$$

Bu vaqtda yangi muvozanat konsentratsiyasi:

$$C_{eq}(T_0 - \Delta T)$$

Hosil bo'ladi, ammo eritmadagi haqiqiy konsentratsiya *darhol o'zgarmaydi*:

$$C \approx C_{eq}(T_0)$$

Natijada yuroqi to'yinganlik yuzaga keladi.

3.3.2. Yuroqi to'yinganlik ifodasini chiqarish

yuroqi to'yinganlik ta'rifi asosan:

$$\sigma(T) = \frac{C - C_{eq}(T)}{C_{eq}(T)} \quad (7)$$

yuqoridagi shartlarni qo'ysak:

$$\sigma(T) = \frac{C_{eq}(T_0) - C_{eq}(T_0 - \Delta T)}{C_{eq}(T_0 - \Delta T)} \quad (8)$$

3.3.3. Kichik harorat o'zgarishi uchun yaqinlashtirish

$\Delta T \ll T_0$ bo'lgani sababli, $C_{eq}(T)$ ni T bo'yicha Taylor qatoriga yoyamiz:

$$C_{eq}(T_0 - \Delta T) \approx C_{eq}(T_0) - \left(\frac{dC_{eq}}{dT} \right)_{T_0} \cdot \Delta T \quad (9)$$

Hosila:

$$\frac{dC_{eq}}{dT} = C_{eq}(T) \frac{\Delta H}{k \cdot T^2} \quad (10)$$

(10) ifodani qo'yib (9) ifodaga qo'ysak

$$C_{eq}(T_0 - \Delta T) \approx C_{eq}(T_0) \left(1 - \frac{\Delta H}{k \cdot T_0^2} \Delta T \right) \quad (11)$$

Endi yuroqi to'yinganlik formulasi:

$$\sigma = \frac{C_{eq}(T_0) \frac{\Delta H}{k \cdot T_0^2} \Delta T}{C_{eq}(T_0)} \quad (12)$$

(12)-ifodani soddalashtirib:

$$\sigma \approx \frac{\Delta H}{k \cdot T_0^2} \Delta T \quad (13)$$

Olingan ifoda quyidagi muhim xulosalarni beradi:

- Yuroqi to'yinganlik *harorat pasayishiga to'g'ri proporsional*;
- yuqori haroratlarda (T_0 katta) yuroqi to'yinganlik sekin ortadi;
- katta ΔH ga ega tizimlarda Yuroqi to'yinganlik tezroq hosil bo'ladi.

Bu natija LPE jarayonida epitaksial o'sishni *haroratni aniq boshqarish orqali nazorat qilish mumkinligini* ko'rsatadi

Oldingi (3.1) bo'limda olingan qalinlik ifodasini hisobga olib:

$$h \propto V \cdot \Delta C \text{ va } \Delta C = C_{eq} \sigma$$

demak:

$$h \propto V \cdot \Delta T$$

Bu eritma hajmi va sovitish rejimi birgalikda epitaksial plyonka qalinligini *belgilashini* matematik jihatdan asoslaydi.

3.4. Massa saqlanish qonuni va uning haroratga bog'liqligi

Ajralib chiqqan kremniy epitaksial qatlamni hosil qiladi:

$$\rho_{Si} \cdot S \cdot h = M_{Si} \cdot V \cdot \Delta C \quad (14)$$

bu yerda: ΔC — eritmadagi kremniy konsentratsiyasining kamayishi.

ρ_{Si} — kremniyning zichligi,

S — epitaksial taglik yuzasi,

h — epitaksial qatlam qalinligi.

M_{Si} — kremniyning molyar massasi,

V — eritma–erituvchi hajmi,

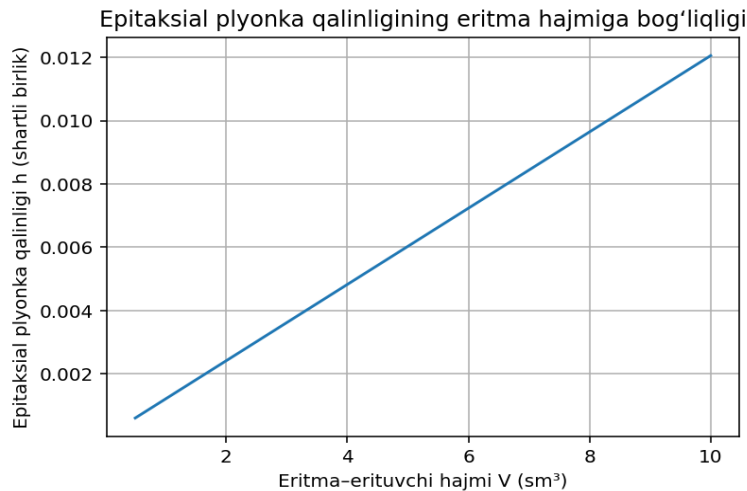
Ushbu ifodadan epitaksial qatlam qalinligi:

$$h = \frac{M_{Si}}{\rho_{Si}} \cdot \frac{V}{S} \cdot \Delta C \quad (15)$$

Agar ΔC va S doimiy bo'lsa:

$$h \propto V$$

ya'ni epitaksial plyonka qalinligi eritma–erituvchi hajmiga *chiziqli bog'liq*.



1-rasm. Quyida nazariy model asosida epitaksial plyonka qalinligining eritma hajmiga bog'liqligi Python yordamida hisoblandi.

Konsentratsiya o'zgarishining haroratga bog'liqligi

(3.3) bo'limda ko'rsatilganidek, eritmadagi muvozanat konsentratsiyasi harorat funksiyasi sifatida ifodalanadi:

$$C_{eq}(T) = C_0 \exp\left(\frac{-\Delta H}{kT}\right)$$

Harorat pasayishi ΔT natijasida konsentratsiya o'zgarishi:

$$\Delta C = C_{eq}(T_0) - C_{eq}(T_0 - \Delta T) \quad (16)$$

Kichik harorat o'zgarishlari uchun:

$$\Delta C \approx \left(\frac{dC_{eq}}{dT}\right)_{T_0} \cdot \Delta T \quad (17)$$

Shundan:

$$\Delta C \approx C_{eq}(T_0) \frac{\Delta H}{kT_0^2} \Delta T \quad (18)$$

Epitaksial qatlam qalinligining haroratga bog'liqligi

(18) ifodani (15) ga qo'yib, epitaksial qatlam qalinligining haroratga bog'liqligi olinadi:

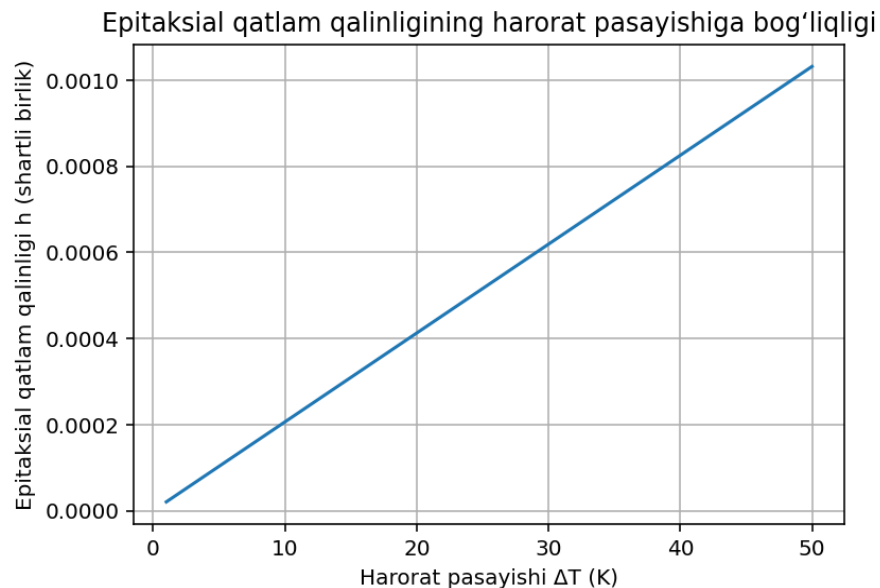
$$h(T) = \frac{M_{Si}}{\rho_{Si}} \cdot \frac{V}{S} \cdot C_{eq}(T_0) \frac{\Delta H}{k T_0^2} \Delta T \quad (19)$$

yoki yakuniy ko‘rinishda:

$$h(T) \propto \frac{V}{S} \cdot \frac{\Delta T}{T_0^2} \quad (20)$$

Olingan ifoda quyidagi muhim xulosalarni beradi:

1. *Epitaksial plyonka qalinligi harorat sovitish intervaliga to‘g‘ri proporsional;*
2. Yuqori boshlang‘ich haroratlarda (T_0) epitaksial o‘rish sekinlashadi;
3. Eritma – erituvchi hajmini oshirish orqali qalin epitaksial qatlam olish mumkin;
4. Sovitish rejimi va eritma hajmi birgalikda epitaksiya jarayonini boshqaruvchi asosiy omillar hisoblanadi.



2-rasm. Grafikdan ko‘rinadiki, epitaksial plyonka qalinligi eritma hajmi oshishi bilan chiziqli ravishda ortadi.

Mazkur natijalar LPE jarayonida epitaksial qatlam qalinligini *harorat va eritma hajmi orqali aniq nazorat qilish imkonini beruvchi analitik modelni* shakllantiradi.

Olingan natijalar LPE jarayonida eritma hajmini oshirish orqali qalin epitaksial qatlamlar olish mumkinligini ko‘rsatadi. Bu holat sanoat texnologiyalarida: kuchlanishga chidamli strukturalar, quvvat yarimo‘tkazgichlari, sensor elementlar uchun muhim hisoblanadi.

Model diffuziya va massa balansi asosida qurilgani sababli real texnologik sharoitlarga yaxshi mos keladi.

Xulosa

Mazkur ishda suyuq fazali epitaksiya (LPE) usulida kremniy taglikda o'stirilgan epitaksial plyonkalar qalinligining eritma–erituvchi hajmiga bog'liqligi matematik jihatdan modellashtirildi. Taklif etilgan nazariy model massa saqlanish qonuni, eritmadagi Yuroqi to'yinganlik hodisasi hamda diffuziya bilan cheklangan epitaksial o'sish mexanizmlariga asoslangan.

Nazariy model Python dasturlash muhiti yordamida sonli hisoblashlar va grafiklar orqali tasdiqlandi. Grafik natijalar epitaksial plyonka qalinligining eritma hajmi oshishi bilan chiziqli ravishda ortishini yaqqol ko'rsatdi, bu esa ishlab chiqilgan modelning ichki mantiqiy izchilligi va fizik asoslanganligini ko'rsatadi.

Olingan natijalar LPE texnologiyasida epitaksial qatlam qalinligini harorat rejimi va eritma hajmini boshqarish orqali aniq nazorat qilish imkonini beradi. Mazkur model quvvat yarimo'tkazgichlari, kuchlanishga chidamli strukturalar hamda sensor elementlar ishlab chiqarishda texnologik jarayonlarni optimallashtirish uchun amaliy ahamiyatga ega. Kelgusida modelga konvektiv massa ko'chishi va real eritma–taglik interfeysi effektlarini kiritish orqali uni yanada takomillashtirish mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar:

Sapaev, I. B., Sapaev, B., Umarov, A. V., Mirsalihov, B. A., Yuldashev, Q. A., & Imamkulov, N. (2022, June). Chemical element distribution of cadmium sulfide obtained on silicon substrate. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 2432, No. 1, p. 050025). AIP Publishing LLC.

Kshirsagar, C. et al. (2025). *Seed-Layer-Assisted Liquid-Phase Epitaxial Growth of YIG Films on Single-Crystal YAG Substrates: Evidence for Enhancement in Strain-Induced Anisotropy*. *Crystals*, 15(11), 953.

Dubs, C. et al. (2020). *Low damping and microstructural perfection of sub-40 nm-thin yttrium iron garnet films grown by liquid phase epitaxy.*

Baillard, A. et al. (2023). *Liquid phase epitaxy growth and visible emission of Tb^{3+} doped films.*