

**Ge_{1-x}Sn_x YARIMO'TKAZGICHLI QATTIQ QORISHMA ZONA
TUZILISHINING XUSUSIYATLARINI O'RGANISH****Jumaniyozova Darmonjon Ro'zmetovna¹**¹ *Urganch davlat universiteti fizika yo'nalishi**magistranti***MAQOLA
MA'LUMOTI****ANNOTATSIYA:****MAQOLA TARIXI:***Received: 07.10.2024**Revised: 08.10.2024**Accepted: 09.10.2024***KALIT SO'ZLAR:***Ge_{1-x}Sn_x,
yarimo'tkazgichlar,
kristall, CMOS,
biotibbiy zondlash, xSn_x
SGBs, Nano-XRF,
pseudomorf, mikro-
disklar, XRF va XANES
o'lchovlari.**GeSn va GeSnSi ning epitaksial plyonkalarini o'stirishning texnologik xususiyatlari, ular, qoida tariqasida, elastik ta'sirga ega bo'lishiga olib keladi. Plyonkalardagi deformatsiyalar Ge, Si, Sn panjara parametrlari o'rtasidagi nomuvofiqlik bilan ham, plyonkalarining geometriyasi (birinchi navbatda qalinligi) va ularning termal xususiyatlari (issiqlik kengayish koeffitsienti) bilan bog'liq. Bundan tashqari, o'sishdan keyingi issiqlik bilan ishlov berish epitaksial qatlamlar chegaralarida noto'g'ri dislokatsiyalar harakati tufayli elastik-stress holatini o'zgartirishi mumkin. Epitaksial o'stirilgan Ge_{1-x}Sn_x yarimo'tkazgich plyonkalarining xususiyatlari turli eksperimental va nazariy usullar bilan o'rganiladi.*

KIRISH. Epitaksial o'stirilgan Ge_{1-x}Sn_x yarimo'tkazgich plyonkalarining xususiyatlari turli eksperimental va nazariy usullar bilan o'rganiladi. Panjara parametrlari, tarkibi x, o'stirilgan qatlamlarning qalinligi va bir xilligi tajribada yuqori aniqlik bilan aniqlanadi, noto'g'ri dislokatsiyalari bo'lgan qatlamlar orasidagi interfeyslar kuzatiladi va plyonka tekisligidagi va unga perpendikulyar deformatsiyalar bilvosita baholanadi. Nazariy hisob-kitoblar muvozanat panjara parametrini va energiya bandi strukturasi hisoblash imkonini berdi. Eng informatsion eksperimental usullardan biri bu Ramanning tarqalishi (RS) hodisasiga asoslangan Raman spektroskopiyasidir. Ushbu buzilmaydigan texnika plyonkalarining tarkibi va ulardagi deformatsiyalar haqida ma'lumot olish imkonini beradi. Biz yarim empirik Tersoff atomlararo o'zaro ta'sir potentsialiga asoslangan strukturaviy xususiyatlarni hisoblashni taklif qilingan. Ushbu yondashuv qotishma hosil bo'lishida kristall panjaraning buzilishlarini boshqa nuqtai nazardan o'rganish, Vegard qonunidan

chetlanishlarni o'rganish va x o'zgarishlarining butun diapazoni bo'yicha o'ziga xos strukturaviy xususiyatlarni olish imkonini beradi. Adabiyotlarda kremniy texnologiyasiga integratsiyalashuv imkoniyati bilan davriy tizimning IV guruh elementlarining yarimo'tkazgichli qattiq eritmaları asosida qiziqarli optoelektronik qurilmalarni yaratish imkoniyati qayd etilgan. $Ge_{1-x}Sn_x$ qotishmasi buning uchun eng istiqbolli bo'lib, eksperimental va nazariy jihatdan intensiv o'rganilmoqda. Ushbu ishning maqsadi uning strukturaviy xususiyatlarini modellashtirishdir: kristall panjaraning o'zgarishi, atomlararo bog'lanish uzunligi, tarkibiga qarab bog'lar orasidagi burchaklarning o'zgarishi ko'riladi. $Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq eritmasi qalay fraktsiyasining $0 < x < 0,2$ amaliy muhim diapazonida ham, x ning har qanday nazariy jihatdan qiziqarli qiymatida ham o'rganiladi. Taxminan 4 ming atomdan iborat klaster Tersoff potensialidan foydalangan holda molekulyar dinamika tomonidan simulyatsiya qilinadi va o'rganiladi. Tarkibga panjara parametri, bog'lanish uzunliklari va bog'lanishlar orasidagi burchaklarning bog'liqliklari olingan. Taqqoslash eksperimental va hisoblangan natijalar bilan amalga oshiriladi. Vegard qonunidan chetga chiqish va qotishma tarkibidagi o'zgarishlar bilan Ge-Ge, Ge-Sn, Sn-Sn bog'lanishlarining panjara buzilishiga sezilarli darajada farqli hissi aniqlanadi.

Modellashtirish texnikasi: $N \times N \times N$ o'lchamdagi kub shaklida N^3 atomlari klasterini ideal olmos strukturasi elementar hujayralarini simulyatsiya qilingan. $N = 8$ da klaster 4096 atomni o'z ichiga oladi, kub o'lchami $\approx 4,5-5,2$ nm. Dastlabki panjara parametri Vegard qonuni asosida x tarkibiga muvofiq tanlangan. Shu tarzda qurilgan panjaraning tugunlari tasodifiy ravishda x Sn atomlarining fraktsiyalari va Ge atomlarining $(1 - x)$ fraktsiyalari bilan to'ldirilgan. Atomlar o'rtasidagi o'zaro ta'sir Tersoff potensialida aniqlangan, IV guruh elementlarining atomlararo aloqalarini tavsiflash uchun moslashtirilgan va ko'pincha olmosli tuzilishga ega kristallarni modellashtirish uchun ishlatiladi. Sof germaniy va a-qalayning panjara parametrlaridagi farq tufayli hosil bo'lgan struktura muvozanatsiz bo'lib chiqqan. Keyinchalik, Verlet algoritmidan foydalangan holda molekulyar dinamika usulidan foydalanib, uni minimal potensial energiyaga bo'shatish amalga oshirilgan. Davriy chegara shartlari qo'llanilgan. Energiyaning tarqalishi ma'lum vaqtlarda kinetik energiyani sun'iy ravishda kamaytirish orqali amalga oshirilgan.

Bo'shashgandan so'ng, strukturaviy xususiyatlar hisoblab chiqilgan: har xil turdagi qo'shni atomlar orasidagi bog'lanish uzunligi - Ge-Ge, Ge-Sn, Sn-Sn, ularning o'rtacha qiymatlari va kattalik bo'yicha taqsimlanish gistogrammalari, bog'lanishlar orasidagi turli burchaklar uchun bir xil. . Juft korrelyatsiya funksiyalari, shuningdek, $g(r) = n(r) / n$ sifatida belgilangan davriy chegara shartlarini hisobga olgan holda modellashtirilgan

kristallit atomlari uchun tuzilgan, bunda ni – Ge yoki Sn atomlari markazlarining o‘rtacha soni. radiusi r dan $r+Dr$ gacha bo‘lgan sferik qatlam bir xil turdagi atomga markazlashgan, n bu turdagi atomlarning umumiy soni.

Bunday holda, 3-4 dan ko‘p bo‘lmagan muvofiqlashtirish sohalarini ko‘rib chiqish va panjara parametrining yuzdan biriga teng Dr ni olish etarli bo‘lgan. Ma'lumki, juft korrelyatsiya funksiyasi qotishmaning qisqa masofali tartibini tavsiflaydi.

Hisob-kitoblarni amalga oshirayotganda, o‘rtacha qiymatlardan eng katta og‘ishlar qalay atomlarining ideal geometrik tuzilish tugunlari o‘rtasida dastlabki tasodifiy taqsimlanishi tufayli yuzaga kelganligi ma‘lum bo‘lgan. Shuning uchun, quyida keltirilgan barcha natijalar simulyatsiya qilingan kristallitning kamida o‘nta tasodifiy realizatsiyasini o‘rtacha hisoblash yo‘li bilan olingan.

Vegard qonunidan chetga chiqish

Ko‘rib chiqilayotgan $Ge_{1-x}Sn_x$ qotishmalari uchun, birinchi taxminga ko‘ra, panjara parametri x tarkibiga chiziqli bog‘liq deb taxmin qilinadi:

$$a_{GeSn}(x) = a_{Ge}(1-x) + a_{Sn}x \quad (1)$$

bu yerda a_{Ge} , a_{Sn} mos ravishda sof Ge va α -Sn ning panjara parametrlari. Munosabat (1), ma'lumki, Vegard qonuni deyiladi. Biroq, tajribalar va namunaviy hisoblar aniqroq ko‘rib chiqilsa, ushbu qonundan chetga chiqishni ko‘rsatadi. Bundan tashqari, shunga o‘xshash $Ge_{1-x}Sn_x$ qotishmasi bilan solishtirganda, og‘ish sezilarli darajada kattaroq va og‘ish belgisi salbiy emas, balki ijobiydir. (1) o‘rniga formuladan foydalanish taklif etiladi.

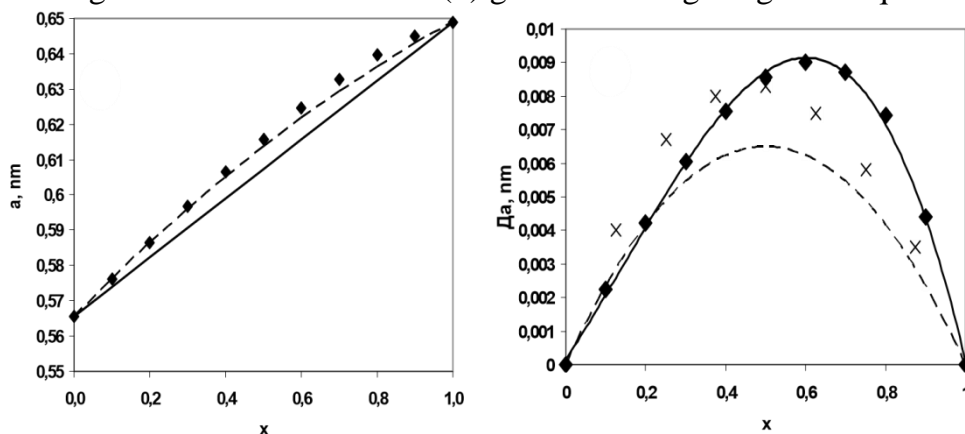
$$a_{GeSn}(x) = a_{Ge}(1-x) + a_{Sn}x + \theta(1-x)x, \quad (2)$$

bu yerda doimiy θ qiyalik parametri deyiladi. θ ning qiymati bo‘yicha, ayniqsa, x o‘zgarishlarning butun diapazoni uchun hali konsensus yo‘q (esda tutingki, $0 < x < 0,2$ qiymatlari eksperimental ravishda erishilgan; ba’zi boshqa kompozitsiyalar uchun ham nazariy ab initio hisoblari mavjud).

Bu modeldan foydalanib, x uchun kompozitsiyaning funktsiyasi sifatida panjara parametr qiymatlarini nol haroratda (ya’ni, barcha atomlarning harakati to‘xtaganda) 0,1 ga oshib hisoblab chiqilgan. Berilgan kompozitsiya uchun dastlab chiziqli Vegard qonuniga mos keladigan panjara parametri $a_{GeSn}(0)$ ko‘rsatilgan va bo‘shashgandan keyin kristallitning potentsial energiyasi aniqlangan.

Bog‘lanishlarning grafiklarda tasvirlanishi: Xuddi shunday potentsial energiyalar a_{GeSn} ning $a_{GeSn}(0)$ dan kichik og‘ishi uchun ham hisoblangan. Potentsial energiyaning a_{GeSn} ga bog‘liqligi minimal bo‘lib, uni aniqlash hisob-kitoblarning asosiy

maqsadidir. 1-rasmda muvozanat panjarasi parametrining x tarkibiga bog'liqligi va uning $\Delta a_{GeSn} = a_{GeSn} - a_{GeSn}(0)$ Vegard qonunidan chetlanishi ko'rsatilgan. Bu erda hisoblangan ma'lumotlar formula (2) ga mos keladigan egri chiziq.



1-rasm. 1. Panjara parametrining qalay ulushiga (a) bog'liqligi va qonundan chetga chiqishi. Vegarda (b): olmos – asosiy ma'lumotlar; kesilgan chiziq - formula (2) bo'yicha mos; (a) dagi qattiq chiziq - Vegard qonuniga ko'ra; (b) dagi qattiq chiziq - (3) formulaga muvofiq mos keladi; kesishadi (b) - hisoblash [4]

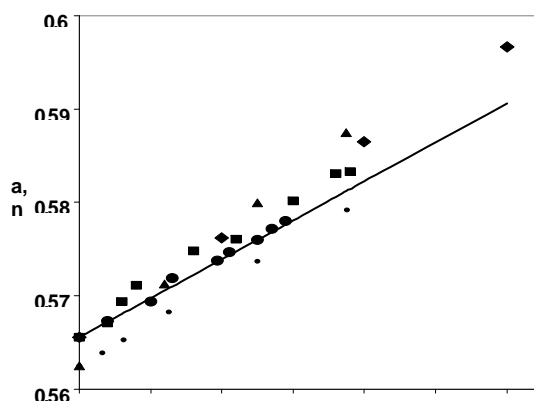
$0 < x < 0,2$ kompozitsiyalarning amaliy jihatdan muhim diapazonida eng yaxshi natija $\theta = 0,026$ nm da olinadi. Bu qiymat [6] da olingan $0,00088$ nm eksperimental qiymatidan sezilarli darajada farq qiladi (xato bu qiymatdan oshib ketadi), lekin ab initio hisoblangan $0,032$ nm qiymatiga yaqin [4]. Ko'rinib turibdiki, natijalar (2) tomonidan olingan simmetrik egri chiziqdan farq qiladi. Vegard qonunidan maksimal og'ish $x = 0,5$ da emas, balki $x = 0,6$ da erishiladi.

Uchinchi darajali ko'phad bilan yaqinlashish munosabatni beradi

$$\Delta a = 0,018x + 0,014x^2 - 0,032x^3, \text{ nm. (3)}$$

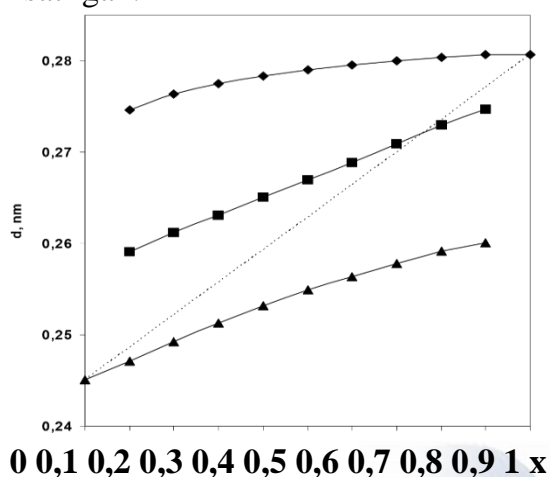
Olingan ma'lumotlarni kompozitsiyalarning amaliy jihatdan muhim sohasidagi boshqa ishlarning natijalari bilan taqqoslash rasmda ko'rsatilgan. 2. Berilgan $a(x)$ bog'liqliklar bir-biridan biroz farq qilishini ko'rish mumkin. Bu qisman turli xil hisoblash usullari va epitaksial plyonkalarini olishning turli usullari va o'lchash xatolariga bog'liq.

Eksperimental ma'lumotlar plyonkalardagi qoldiq elastik stresslar tufayli ham farq qilishi mumkin. Ko'rinib turibdiki, Tersoff potentsialidan foydalangan holda bu hisob-kitoblarning natijalari odatda x ning kichik qiymatlari mintaqasidagi boshqa ma'lumotlar bilan yaxshi mos keladi.



2-rasm. Kichik x qiymatlari mintaqasidagi tarkibga qarab panjara parametri: adabiyot ma'lumotlari bilan taqqoslash. Olmos - bu asosiy natijalar; uchburchaklar - zichlik funksional nazariyasi (DFT) yordamida hisoblash [3]; kvadratchalar - kimyoviy bug'larni cho'ktirish orqali o'stirilgan plyonkalar bo'yicha eksperimental ma'lumotlar [11]; doiralar - molekulyar ravishda olingan filmlar bo'yicha eksperimental ma'lumotlar nur epitaksisi [6]; ball - DFT yordamida hisoblash, lekin buyurtma uchun (tasodifiy emas) qotishmalar [1]; to'g'ri chiziq - Vegard qonuniga ko'ra

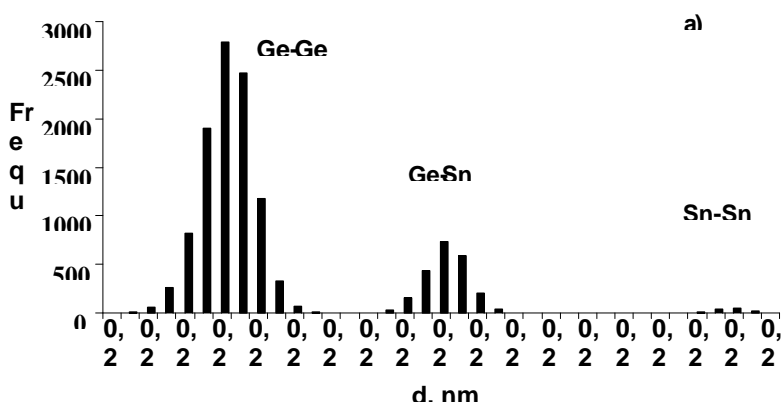
Bundan tashqari, Sn-Sn bog'lanish uzunligi tarkibiga qarab eng kam o'zgarishini ko'rish mumkin, bundan tashqari, kichik x da bu bog'liqlik chiziqli emas. Bundan tashqari, rasm. 3 Sn-Ge aloqalari kuchliroq o'zgarishini va Sn-Sn bog'lanishlari kamroq o'zgarishini ko'rsatadi, bu esa Ge-Ge aloqalari eng ko'p o'zgargan ishdan farq qiladi . 3-rasm. Bog'lanish uzunliklarining qalay fraktsiyasiga bog'liqligi. Olmos - Sn-Sn obligatsiyalari; kvadratchalar - Ge-Sn; uchburchaklar - Ge-Ge; kesilgan chiziq - Vegard qonuniga ko'ra bundan tashqari, $x = 0,1$ va $x = 0,5$ da bog'lanish uzunligi taqsimotining histogrammalari tuzilgan, ular rasmda ko'rsatilgan.

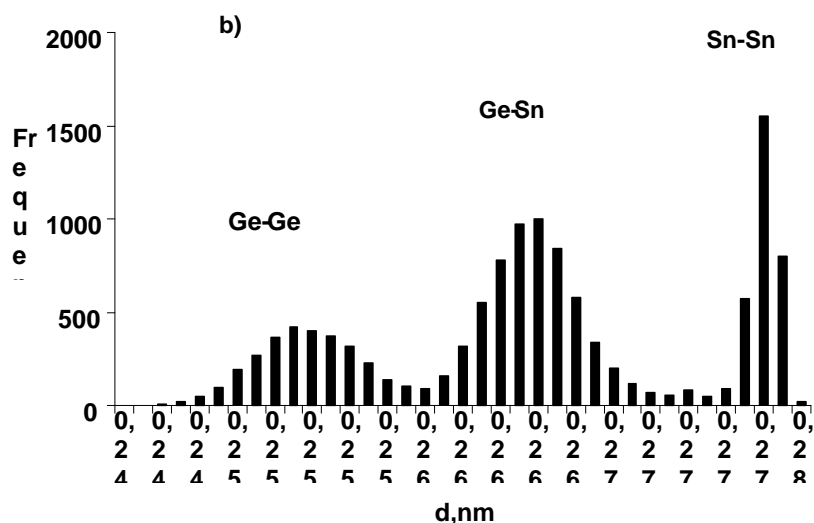


3-rasm. har xil turdagi atomlararo bog'lanish uzunligining qalay fraksiyasiga bog'liqligi ko'rsatilgan: Sn-Sn, Sn-Ge, Ge-Ge. Ko'rinib turibdiki, ular Vegard qonunidan sezilarli darajada farq qiladi. Bu shuni ko'rsatadiki, qalay atomlari germaniyaning olmos panjarasiga kiritilganda, panjara assimetrik tarzda qayta tartibga solinadi, ya'ni olmos bo'lishni to'xtatadi. Shunga o'xshash naqshlar GeSi qotishmasini modellashda ham topilgan, ammo bu erda bu og'ishlar ancha katta, bu Si va Ge ga qaraganda α -Sn panjara parametri va Ge ning panjara parametri o'rtasidagi katta farq bilan bog'liq.

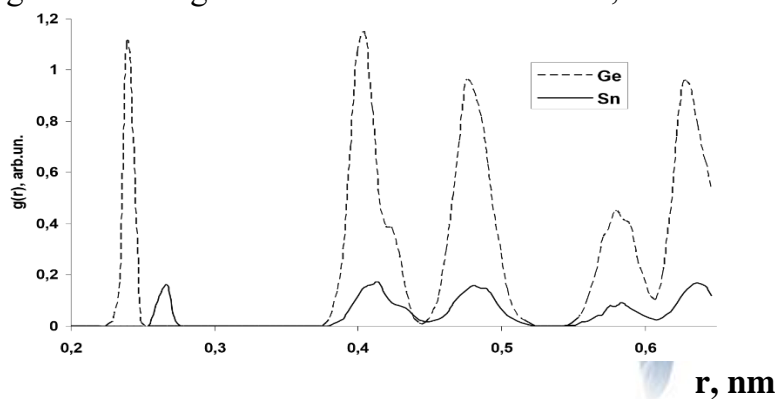
Gistogrammalardan ko'rinib turibdiki, qalay fraksiyasining ko'payishi tegishli Ge-Ge va Ge-Sn bog'lanish cho'qqilarining siljishi va kengayishiga olib keladi, ammo Sn-Sn bog'lanishlarining tarqalishi deyarli oshmaydi, garchi bu cho'qqining maksimali ham rasmga muvofiq siljiydi. 3. da tasvirlangan texnikaga muvofiq juftlashgan korrelyatsiya funksiyalarini modellashtirish muhim ko'rinadi. Bu funksiyalar dr eni sferik qatlamdagi atomni boshqa atomdan r masofada topish ehtimolini ko'rsatadi. Juftlik korrelyatsiyasi funksiyasi qisqa masofali tartibni tavsiflash vositasidir. Shaklda. $5 \times = 0,25$ uchun g (r) ni ko'rsatadi.

Cho'qqilar birinchi, ikkinchi va boshqalardagi atomlarning joylashishiga mos keladi. mos ravishda Ge va Sn uchun muvofiqlashtirish sohalari. Ko'rinib turibdiki, Ge-Ge va Sn-Sn aloqalarining qisqa masofali tartibi faqat birinchi koordinatsion sferada farqlanadi: Ge va Sn uchun birinchi cho'qqilar siljiydi. Uzoq koordinatsion sohalarda atomlarning joylashishi o'zaro bog'liq emas (germaniy va qalay uchun cho'qqilar r ning bir xil qiymatlarida va ular kengroq). Xuddi shu naqsh x ning boshqa qiymatlari uchun ham kuzatiladi. E'tibor bering, cho'qqilarning kengayishi issiqlik harakati bilan bog'liq emas, balki Ge va Sn atomlarining hisoblash katakchasiga tasodifiy taqsimlanishi bilan bog'liq.

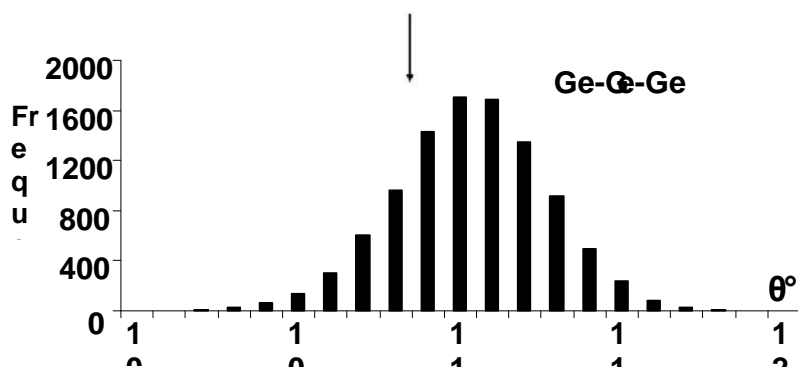




4-rasm. Bog lanish uzunliklarining taqsimlanish gistogrammalari: a) $x = 0,1$; b) $x = 0,5$ Bog'lar orasidagi burchaklar: Qotishmaning kristall tuzilishini qalay ulushining ortishi bilan qayta qurish, shuningdek, eng yaqin qo'shnilarning bog'lanishlari orasidagi burchaklarning o'zgarishidan dalolat beradi. Jami oltita shunday burchaklar mavjud: Sn-Sn-Sn, Sn-Sn-Ge va boshqalar. Ulardan ba'zilari uchun qiymat bo'yicha taqsimotning gistogrammalari rasmda ko'rsatilgan. 6. Ko'rinib turibdiki, burchaklar etarlicha keng diapazonda taqsimlangan va tarqalish maksimumlari ideal olmos konstruksiyasining $109,5^\circ$ tetraedral burchagidan siljigan. Xususan, Sn-Sn-Sn aloqalari orasidagi burchaklar o'rtacha kichikroq, Ge-Ge-Ge bog'lari orasidagi burchaklar esa o'rtacha $109,5^\circ$ dan katta.



5-rasm. $Ge_{0.75}Sn_{0.25}$ qotishmasi uchun juft korrelyatsiya funktsiyasi; r - ko'rish radiusi. Har bir cho'qqi ma'lum bir muvofiqlashtirish sohasiga mos keladi



6-rasm. $X = 0,2$ da bog'lanishlar orasidagi burchaklarning taqsimlanishining histogramlari.

O'q olmos panjarasidagi tetraedral burchakning ($109,5^\circ$) nazariy qiymatini ko'rsatadi. Shunday qilib, GeSn qotishmasining kristall tuzilishi dam olish vaqtida juda muhim qayta qurishga uchraydi va Vegard qonuniga bo'ysunishni to'xtatadi, bu esa olmos tuzilishi kompozitsiyaga qarab chiziqli ravishda o'zgarishini taxmin qiladi. Ushbu natijaga eng muhim hissa kalay miqdori past bo'lgan hududda a-Sn olmos strukturasi beqarorligidan kelib chiqadi. Shu bilan birga, bu buzilish davriylikning yo'qligini ko'rsatadigan darajada katta emas, bu rentgen difraktometriyasi yordamida qotishmalarining panjara parametrini aniqlash bo'yicha tajribalar natijalari bilan tasdiqlangan.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Tarmoqli bo'shliq va panjara muhandisligi uchun GeSn yarimo'tkazgichlari / M. Bauer, J. Taraci, J. Tolle, A.V.G. Chizmeshya, S. Zollner, Devid J. Smit, J. Menendez, Changvu Xu, J. Kouvetakis // Ilova. fizika. Lett. – 2002. – jild. 81. – B. 2992–2994.
2. Kouvetakis, J. Tin asosidagi IV guruh yarimo'tkazgichlari: silikonda opto- va mikroelektronika uchun yangi platformalar / J. Kouvetakis, J. Menendez, A. V. G. Chizmeshya // Ann. Rev. Mater. Res. – 2006. – jild. 36. – B. 497 – 554.
3. Chibane, Y. Kichik Sn kompozitsiyalari uchun $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ qotishmalarining elektron tuzilishi: g'ayrioddiy strukturaviy va elektron xususiyatlar / Y. Chibane, M. Ferhat // J. Appl. fizika. – 2010. – jild. 107. – B. 053512.
4. Pulikkotil, J. J. Kogerent potentsial yaqinlashuvdan olingan $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x$ tasodifiy qotishmalarining tuzilishi / J. J. Pulikkotil, A. Chronos, U. Schwingenschlöggl // J. Appl. fizika. – 2011. – jild. 110. – B. 036105.

5. Gupta, S. Sn qotishma va tashqi kuchlanish integratsiyasi orqali germaniyda to'g'ridan-to'g'ri tarmoqli bo'shlig'iga erishish / S. Gupta, B. Magyari-Kope, Y. Nishi, K. C. Soraswat // J. Appl. fizika. – 2013. – jild. 113. – B. 073707.

6. Molekulyar nur epitaksisi bilan o'stirilgan GeSn qotishmalarining panjara konstantasi va o'rnini bosuvchi tarkibi / N. Bhargava, M. Coppinger, J. Prakash Gupta, L. Wielunski, J. Kolodzey // Appl. fizika. Lett. – 2013. – jild. 103. – B. 041908.

7. Ventura, C. I. Ko'p aloqali quyosh xujayralari uchun $Ge_{1-x}Si_x$ uchlik qotishmalarining elektron tuzilishi / C. I. Ventura, J. D. Querales-Flores, J. D. Fuhr, R. A. Barrio // Prog. Fotovolt: Res. Ilova. – 2015. – jild. 23. – B. 112–118.

8. Kasper, E. Germanium qalay: o'rta infraqizil tomon kremniy fotonikasi / E. Kasper, M. Kittler, M. Oehme, T. Argyurov // Foton. Res. – 2013. – jild. 1. – B. 69–76.

9. Silikongermaniy-qalay uchlik qotishmalarining Raman tebranish rejimlariga deformatsiya va kompozitsion ta'siri / J.-H. Furnier-Lupien, S. Mukherji, S. Virts, E. Pippel, N. Xayazava, G. Mussler, J. M. Xartman, P. Dejardin, D. Buka, O. Moutanabbir // Ilova. fizika. Lett. – 2013. – jild. 103. – B. 263103.

10. Shen, J. Ab initio tasodifiy qotishmalarning tuzilishini hisoblash $SnxGe_{1-x}$ / J. Shen, J. Zi, X. Xie // Phys. Rev. B. – 1997. – jild. 53. – B. 12084–12087.

11. Chizmeshya, A. V. G. $SnxGe_{1-x}$ tizimida Vegard qonunidan og'ishlarni eksperimental va nazariy o'rganish / A. V. G. Chizmeshya, M. R. Bauer, J. Kouvetakis // Chem. Mater. – 2003. – jild. 15. – B. 2511-2519.

12. $SnxGe_{1-x}$ yarimo'tkazgichlarining elektron tarmoqli tuzilmalari: Birinchi printsiplar zichligi funksional nazariyasini o'rganish / M. H. Li, P. L. Liu, Y. A. Xong, Y. T. Chou, J. Y. Xong, J. Y. Siao // J. Appl. fizika. – 2013. – jild. 113. – B. 063517.