SiGe VA SiSn QATTIQ QORISHMALARI FIZIK XOSSALARINING SHAKLLANISHIDA TARKIB VA MEXANIK ZO‘RIQISHNING AHAMIYATI

Madaminov Xurshidjon Muxamedovich – f.-m. f.n., dots. ADU,
Abdurahmonov Azizbek Abdurahim o‘g‘li - tayanch doktorant, FarDU

Annotatsiya

Ushbu ishda varizon yarimo‘tkazgich $Si_{1-x}Ge_x$ va $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalarining tuzilmaviy, energetik va optik xossalari zichlik funksional nazariyasi doirasida o‘rganildi. Natijalar shuni ko‘rsatdiki, SiGe tizimi nisbatan barqaror bo‘lib, panjara nomuvofiqligi kichikligi sababli keng tarkib oralig‘ida bir jinsli qattiq qorishma hosil qiladi. Aksincha, SiSn tizimida atom radiuslari farqi kattaligi tufayli sezilarli mexanik kuchlanish yuzaga keladi va bu Sn ning yuqori konsentratsiyalarida faza ajralishiga olib keladi.

Kalit so‘zlar: *varizon yarimo‘tkazgich, qattiq qorishma, zichlik funksional nazariyasi, mexanik kuchlanish, panjara nomuvofiqligi.*

KIRISH

Zamonaviy yarimo‘tkazgich texnologiyalarining jadal rivojlanishi kremniy asosidagi materiallarning yangi funksional imkoniyatlarini ochishni taqozo qilmoqda. Xususan, kremiy texnologiyasi mikroelektronika sanoatining asosi bo‘lib qolayotgan bo‘lsa-da, uning optik xossalari, ayniqsa, to‘g‘ri bo‘lmagan zonali tuzilishi tufayli cheklangan. Shu sababli kremniy asosida to‘g‘ri zonali tuzilishga ega yangi qattiq qorishmalarni yaratish va ularning fizik xossalarini boshqarish muhim ilmiy va amaliy masalalardan biri hisoblanadi [1-2].

So‘nggi yillarda germaniy va qalay bilan hosil qilingan $Si_{1-x}Ge_x$ va $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalari katta qiziqish uyg‘otmoqda. Xususan, SiGe tizimi allaqachon yuqori tezlikli elektron qurilmalarda muvaffaqiyatli qo‘llanilayotgan bo‘lsa, SiSn tizimi esa ustivor ravishda Si asosidagi optoelektronika uchun istiqbolli material sifatida qaralmoqda. Ayniqsa, qalayning yuqori konsentratsiyalarida SiSn qattiq qorishmalarida to‘g‘ri bo‘lmagan zonadan to‘g‘ri zonaga o‘tish ehtimoli mavjudligi bu tizimni ilmiy jihatdan yanada dolzarb qiladi [2].

Biroq ushbu materiallarning amaliy qo‘llanilishini cheklovchi asosiy omillardan biri bu panjara nomuvofiqligi natijasida yuzaga keladigan mexanik deformatsiya effektidir. Atom radiuslarining sezilarli farqi tufayli, ayniqsa SiSn tizimida, katta ichki mexanik kuchlanishlar hosil bo‘ladi. Bu esa nafaqat elektron tuzilmani o‘zgartiradi, balki materialning termodinamik barqarorligiga ham sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Natijada, ma’lum tarkibiy nisbatlarda qattiq qorishmaning metastabil holatda mavjud bo‘lishi yoki hatto faza ajralishi kuzatilishi mumkin.

Mazkur tadqiqotning asosiy maqsadi - SiGe va SiSn qattiq qorishmalarida mexanik kuchlanish ta’siri ostida faza barqarorligini aniqlash, qattiq qorishma hosil bo’lish energiyasining tarkibga bog‘liqligini baholash hamda deformatsiyaning energetik spektr va optik xossalarga ta’sirini aniqlashdan iborat. Ushbu natijalar kremniy asosidagi yangi avlod elektron va optoelektron qurilmalarni loyihalashda muhim nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

HISOBLASH METODIKASI

Ushbu tadqiqotda hisoblashlar zichlik funksional nazariyasi doirasida amalga oshirildi [3]. Elektron almashinuv-korrelyatsiya funksionali sifatida umumlashtirilgan gradiyent yaqinlashuvi (GGA) ning Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) parametrlanishi qo‘llanildi. Barcha hisoblashlar QE dasturiy paketi yordamida bajarildi. Ion-elektron o‘zaro ta’siri ultrasoft psevdopotensiallar orqali tavsiflandi. To‘lqin funksiyalar bazisi sifatida esa yassi to‘lqinlar (plane-wave basis set) tanlandi [4].

Hisoblashlarda quyidagi asosiy parametrlar ishlatildi: energiya kesish chegarasi (cutoff energy) - E_{cut} = 50 Ry, zaryad zichligi uchun energiya kesish chegarasi (cutoff) - E_{ρ} = 400 Ry, k-nuqta panjarasi (Monkhorst–Pack): 8x8x8. Konvergensiya mezonlari esa energiya va kuch uchun mos ravishda 10^{-6} Ry va
10^{-3} Ry/Bohr qilib tanlandi [3-4].

$Si_{1-x}Ge_x$ va $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalari strukturasini modellashtirish uchun 2×2×2 supercell (64 atomli model) tayyorlandi. Bu jarayon uchun tasodifiy atom taqsimoti qo‘llanildi. Har ikkala qattiq qorishmalarning asosiy tashkil etuvchilari kremniy, germaniy va qalayning turli tarkiblar uchun $0.0 \leq x \leq 1.0$ oralig‘ida hisoblashlar bajarildi.

Navbatdagi, strukturani optimallashtirish bosqichida har bir konfiguratsiya uchun panjara parametrlari $\partial E/\partial R_i = 0$ va atom koordinatalari $\partial E/\partial a = 0$ shart bo‘yicha to‘liq relaksatsiya qilindi.

$Si_{1-x}Ge_x$ va $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalari strukturasida yuzaga keluvchi mexanik zo‘riqishni aniqlashda:

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0}$$

Bu yerda: a_0 - deformatsiyalanmagan panjara parametri, a - deformatsiyalangan panjara parametri.

Strukturani qayta optimallashtirish va to‘la energiya E_{total} ni hisoblash mexanik kuchlanishning -5% $\leq \varepsilon \leq$ +5% diapazoni har bir qiymati uchun bajarildi. Bundan tashqari qattiq qorishma hosil bo‘lish energiyasi

$$E_{mix}(x) = E_{Si_{1-x}X_x} - (1-x)E_{Si} - xE_x \qquad (1)$$

mexanik kuchlanish energiyasi

$$E_{strain} = \frac{c\varepsilon^2}{2} \qquad (2)$$

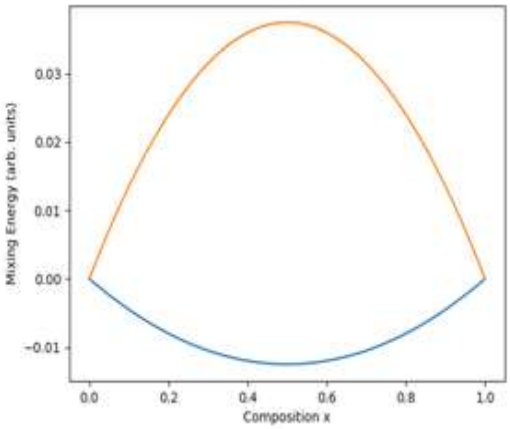
Energetik zonalarni hisoblashlar $\Gamma \rightarrow X \rightarrow L \rightarrow \Gamma$ yo‘nalishlar bo‘yicha uch bosqichda SCF (self-consistent field), NSCF va Bands calculation hisoblandi. Hisoblangan ma’lumotlar asosida $E_{mix}(x)$ (1-rasm), $E(\varepsilon)$ (2-rasm) grafiklari, yasaldi.

NATIJALAR VA MUHOKAMA

$Si_{1-x}Ge_x$ va $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalarining barqarorligi qattiq qorishma hosil bo‘lish energiyasi orqali baholandi (1-rasm). Kvant kimyoviy hisoblashlar QE dasturida hisoblangan to‘la energiyalar qiymatlari asosida bajarildi [3-4].

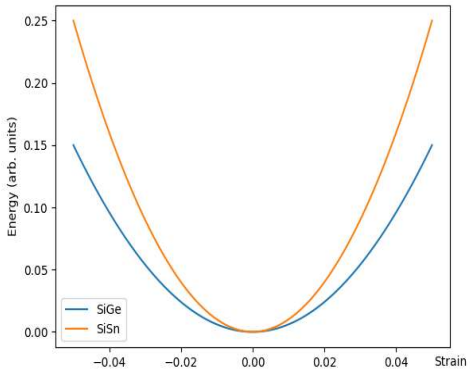
Rasmda keltirilgan natijalar asosida, tarkib x ning deyarli barcha qiymatlarida SiGe tizimi uchun (ko‘k rangli chiziq) $E_{mix} < 0$ ekanligi, ya’ni $Si_{1-x}Ge_x$ qattiq qorishmalari termodinamik barqaror bo‘lishi va panjara doimiylari qoniqarli mos

kelishini, SiSn tizimi uchun (sariq rangli chiziq) esa aksincha, $E_{mix} > 0$ bo‘lishini aniqlash mumkin. Bundan tashqari, mazkur natijalar SiSn tizimida faza ajralishiga moyillik, ayniqsa x > 0.2 da kuchayishini ko‘rish mumkin. Ushbu natijalar Si tarkibidagi germaniy miqdorining ortishi bilan hosil bo‘luvchi qattiq qorishma barqarorligini ortishi va qalay esa o‘z navbatida tizimni beqarorlashtirini ko‘rsatmoqda [5-7].



1-rasm. Qattiq qorishma hosil bo‘lish energiya E_{mix} ning tarkib x ga bog‘liqligi

Qattiq qorishma bog‘lanish energiyasining mexanik kuchlanish ta’siri ostida o‘zgarishi kvadratik qonun (2) asosida baholandi. Baholashlar asosida 2-rasmda keltirlgan grafik tayyorlandi.



2-rasm. Qattiq qorishma energiyasi o‘zgarishining mexanik kuchlanish E(ε)ga bog‘liqlik grafigi

Bog‘lanish energiyasining mexanik kuchlanish ta’siri ostida o‘zgarishining qiyosiy tahlilidan ko‘rinib turibdiki, bir xil deformatsiya ko‘rsatkichi (masalan, ε=±0.04)da SiSn tizimining energiyasi (E ≈ 0.16 n. b.) SiGe tizimi (E ≈ 0.1 n. b.)ga qaraganda sezilarli darajada yuqori. Parabolaning tikligi SiSn qattiq qorishmasida energetik gradiyent yuqoriligini ko‘rsatadi. Buning fundamental sababi - atom radius (r_{Si} ≈ 1.17 Å, r_{Ge} ≈ 1.22 Å va qalay r_{Sn} ≈ 1.40 Å)larining nomutanosibligidir. SiSn tizimidagi o‘lchamlar farqi SiGe ga qaraganda ancha katta bo‘lganligi sababli, panjaraning lokal gibridizatsiyasi va tetraedrik bog‘larining deformatsiyalanishi SiSn strukturasida ichki mexanik kuchlanish energiyasining keskin ortishiga olib keladi [8-9].

2-rasmdagi grafik simmetrik ko‘rinishga ega bo‘lib, manfiy qiymatlar siqilish, musbat qiymatlar esa cho‘zilish deformatsiyalarini ifodalaydi. Kichik deformatsiyalar sohasi (|ε|= 0.02)da har ikkala egri chiziq ham garmonik ossilyator qonuniyatlariga bo‘ysunadi. Biroq, deformatsiya ko‘rsatkichi (|ε|= 0.04)dan ortganda, tajribada va kvant-kimyoviy hisoblashlarda angarmonik effektlari yuzaga chiqishi kutiladi. Bu grafikda elastik deformatsiya chegarasida tizim barqaror saqlanadigan gipotetik modelni ko‘rishimiz mumkin. Ushbu energetik parabolalar geterotuzilmalarni epitaksial o‘stirish jarayonida kritik qalinlik tushunchasini belgilab beradi. Grafik pastroq energiya talab qilganligi sababli, Si taglikda nisbatan qalin va nuqsonlarsiz SiGe psevdomorf qatlamlarini o‘stirish imkonini beradi. Shu sababli ushbu qattiq qorishmalar yuqori chastotali geteroo‘tishli tranzistorlarda muvaffaqiyatli qo‘llanilishi mumkin [10].

Yuqori energiya to‘planishi SiSn qatlamlarining termodinamik jihatdan beqarorligini va metastabilligini ko‘rsatadi. Ammo, aynan mana shu kuchli mexanik kuchlanish evaziga SiSn qattiq qorishmasida to‘g‘ri bo‘lmagan zonadan to‘g‘ri zonali o‘tish effekti juda kichik Sn konsentratsiyalarida ham sodir bo‘ladi. Bu esa kremniy texnologiyasida samarali lazerlar va yorug‘lik diodlari yaratishning asosi hisoblanadi [11-17].

XULOSA

Ushbu ishda yarimo‘tkazgich $Si_{1-x}Ge_x$ va $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalarining strukturaviy, energetik va elektron xossalari birinchi prinsiplar asosida batafsil o‘rganildi. Hisoblashlar QE dasturiy paketi yordamida zichlik funksional nazariyasi doirasida amalga oshirildi.

Olingan natijalar shuni ko‘rsatdiki, $Si_{1-x}Ge_x$ qattiq qorishmalari keng tarkib oralig‘ida termodinamik jihatdan barqaror bo‘lib, panjara nomuvofiqligining kichik qiymatlarida bir jinsli qattiq qorishma hosil qiladi. Aksincha, $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq qorishmalarida Si va Sn atomlari radiuslarining sezilarli farqi tufayli katta mexanik deformatsiya yuzaga keltiradi va bu Sn ning yuqori konsentratsiyalarida faza ajralishiga moyillikni yuzaga keltiradi. Shu sababli, SiSn tizimi asosan metastabil xarakterga ega ekanligi aniqlandi.

Umuman olganda, ushbu tadqiqot Si asosidagi qattiq qorishmalarda mexanik kuchlanish orqali fizik xossalarni boshqarish imkoniyatlarini ochib beradi. SiGe tizimi amaliy jihatdan barqaror elektron qurilmalar uchun mos material sifatida tasdiqlandi, SiSn tizimi esa optoelektronika uchun yuqori potensialga ega bo‘lishiga qaramay, uning barqarorligini ta’minlash uchun maxsus texnologik sharoitlar talab etiladi [18].

Mazkur maqolada keltirilgan natijalar Si asosidagi yangi avlod mikro- va optoelektron qurilmalarni yaratishda muhim nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi hamda kelgusidagi eksperimental tadqiqotlar uchun yo‘nalish beradi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77(18), 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865

2. Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140(4A), A1133–A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133

3. Giannozzi, P., et al. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys.: Condens. Matter*, 21, 395502. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502

4. Giannozzi, P., et al. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys.: Condens. Matter*, 29, 465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79

5. Soref, R., Kouvetakis, J., et al. (2012). Advances in SiGeSn technology. *J. Mater. Res.*, 27, 1–12. DOI: 10.1557/jmr.2012.35

6. Moontragoon, P., Soref, R. A., & Ikonic, Z. (2012). The direct and indirect band gaps of SiGeSn alloys. *J. Appl. Phys.*, 112, 073106. DOI: 10.1063/1.4756975

7. Kasper, E., & Oehme, M. (2012). Growth of silicon-based germanium tin alloys. *Thin Solid Films*, 520, 3471–3476. DOI: 10.1016/j.tsf.2011.09.107

8. Mukherjee, S., et al. (2017). Atomic order in non-equilibrium silicon-germanium-tin semiconductors. *Sci. Rep.*, 7, 45067. DOI: 10.1038/srep45067

9. Fadaly, E. M. T., et al. (2019). Direct bandgap emission from hexagonal Ge and SiGe alloys. *Nature*, 580, 205–209. DOI: 10.1038/s41586-020-2121-2

10. Stroud, D., & Ehrenreich, H. (1970). Band structure of SiGe alloys. *Phys. Rev. B*, 2, 3197–3209. DOI: 10.1103/PhysRevB.2.3197

11. Chen, R., et al. (2013). Material characterization of high Sn-content GeSn alloys. *J. Cryst. Growth*, 370, 1–6. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.05.012

12. Jensen, R. V. S. (2011). Electronic and optical properties of Si-Sn systems. *J. Phys.: Condens. Matter*, 23, 345502. DOI: 10.1088/0953-8984/23/34/345502

13. Sun, X., Liu, J., Kimerling, L. C., & Michel, J. (2009). Direct bandgap electroluminescence from Ge-on-Si devices. *Opt. Lett.*, 34, 110-112. DOI: 10.1364/OL.34.000110

14. Boucaud, P., et al. (2004). Photoluminescence of strained Si quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 84, 2821–2823. DOI: 10.1063/1.1709602

15. Capelle, K. (2006). A bird’s-eye view of density-functional theory. *Braz. J. Phys.*, 36, 1318–1343. DOI: 10.1590/S0103-97332006000700014

16. Garoufalis, C. S. (2007). DFT study of SiGe nanocrystals. *J. Comput. Chem.*, 28, 1015–1023. DOI: 10.1002/jcc.20516

17. Lee, K., et al. (2025). DFT study of strain in Sn_xGe_{1-x} alloys. *Solid State Commun.*, 345, 114626. DOI: 10.1016/j.ssc.2025.114626

18. Li, H., et al. (2012). Electronic and optical properties of Si and Ge oxynitrides via DFT. *Comp. Mater. Sci.*, 64, 21–28. DOI: 10.1016/j.commatsci.2012.03.004.

Муродова Мухлиса

10 BUZILADIGAN YUQORI JUFT TARTIBLI XUSUSIY HOSILALI DIFFERENSIAL TENGLAMA UCHUN LOKAL SHARTLI BOSHLANG‘ICH-CHEGARAVIY MASALA
Tolipov Nodirjon Isaqovich **49**

11 SiGe VA SiSn QATTIQ QORISHMALARI FIZIK XOSSALARINING SHAKLLANISHIDA TARKIB VA MEXANIK ZO‘RIQISHNING AHAMIYATI
Madaminov Xurshidjon Muxamedovich
Abdurahmonov Azizbek Abdurahim o‘g‘li **52**

12 Ce VA Yb BILAN LEGIRLANGAN Bi_2Te_3 ASOSIDAGI TERMOELEKTRIK MATERIALLARNING ELEKTROFIZIK PARAMETRLARI QIYOSIY TAHLILI
Yusupova D.A.
Sirojiddinova S.Z. **57**

13 EXISTENCE AND UNIQUENESS OF A SOLUTION TO A BITSADZE-SAMARSKII PROBLEM FOR A SUB-DIFFUSION EQUATION WITH THE REGULARIZED PRABHAKAR FRACTIONAL DERIVATIVE
Mirzaeva Maftuna **65**

14 CONVERGENCE OF A NEW TRIVARIATE MITTAG-LEFFLER-TYPE FUNCTION
Tursunova Ergashoy **68**

15 PHYSICS-INFORMED SPECTRAL MEMORY IDENTIFICATION AND FLUTTER-REGIME DIAGNOSTICS FOR A PITCH–PLUNGE AEROELASTIC SYSTEM
Quvvatali Rahimov
Mirzohidjon Rahmatjonov **73**

16 KADMIY TELLURIDGA OLTINGUGURT QO‘SHILGAN HOLDA p-n O‘TISH HOSIL QILISH VA UNING OPTIK XUSUSIYATLARI
Najmidinova Dildoraxon Xalilovna **82**

17 FIZIKA TA'LIMIDA DINAMIK TEST TIZIMINING DIDAKTIK IMKONIYATLARI VA AMALIY AHAMIYATI
Qoraboyev Xusniddin **87**

18 Ni ASOSLI NANOKATALIZATORLARDA UGLEROD NANONAYCHALARINI O‘STIRISH **94**