ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ

УСМОНОВ ШУКРУЛЛО НЕГМАТОВИЧ

КРЕМНИЙ, АРСЕНИД-ГАЛЛИЙ, РУХ-СЕЛЕН, КАДМИЙ-ОЛТИНГУГУРТИ АСОСИДАГИ ҚАТТИҚ ҚОРИШМАЛАРИДА КИРИТМАЛАРНИНГ ЎЗАРО ТАЪСИРИ ВА УЛАРДАН ОЛИНГАН ГЕТЕРОСТРУКТУРАЛАРНИНГ ЭЛЕКТРОФИЗИК ХОССАЛАРИ

01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc) ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

Докторлик (DSc) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата докторской (DSc) диссертации

Contents of the Doctoral (DSc) Dissertation Abstract

Усмонов Шукрулло Негматович

Усмонов Шукрулло Негматович

Взаимодействие	примесей в т	гвердых р	астворах	на основе	кремн	ния,	
арсенида-галлия,	селенид	а-цинка,	серн	истого-кадми	I R	И	
электрофизически	ие свойства	гетерост	руктур,	полученных	на	ИХ	
основе			•••••		•••••	•••••	31

Usmonov Shukrullo Negmatovich

Interaction	of	impurities	in	solid	solutions	based	on	silicon, gallium	
arsenide,	sele	nide-zinc,	sul	lphide-	-cadmium	and	the	electrophysical	
properties of	of he	eterostructu	res o	obtaine	ed on their	basis .			59

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ	
List of published works	64

ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ

УСМОНОВ ШУКРУЛЛО НЕГМАТОВИЧ

КРЕМНИЙ, АРСЕНИД-ГАЛЛИЙ, РУХ-СЕЛЕН, КАДМИЙ-ОЛТИНГУГУРТИ АСОСИДАГИ ҚАТТИҚ ҚОРИШМАЛАРИДА КИРИТМАЛАРНИНГ ЎЗАРО ТАЪСИРИ ВА УЛАРДАН ОЛИНГАН ГЕТЕРОСТРУКТУРАЛАРНИНГ ЭЛЕКТРОФИЗИК ХОССАЛАРИ

01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc) ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

Фан доктори (DSc) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Махкамаси хузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2017.1.DSc/FM44 ракам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Физика-техника институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгашнинг вебсахифаси (www.fti.uz) ва «ZiyoNet» Ахборот-таълим порталида (www.ziyonet.uz) жойлаштирилган.

Илмий маслахатчи:	Саидов Амин Сафарбаевич физика-математика фанлари доктори, профессор				
Расмий оппонентлар:	Андреев Вячеслав Михайлович техника фанлари доктори, профессор, Россия Фанлар академияси мухбир аъзоси				
	Гулямов Гафур физика-математика фанлари доктори, профессор				
	Арипов Хайрулло Кабулович физика-математика фанлари доктори, профессор				
Етакчи ташкилот:	Ўзбекистон Миллий университети				

Диссертация химояси Физика-техника институти хузуридаги DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 ракамли Илмий кенгашнинг 2018 йил «____» _____ соат ____ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100084, Тошкент шахри, Чингиз Айтматов кўчаси, 2Б-уй. Тел./факс: (+99871) 235-42-91; e-mail: ftikans@uzsci.net, Физика-техника институти мажлислар зали).

Диссертация билан Физика-техника институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (233 рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 100084, Тошкент шахри, Чингиз Айтматов кўчаси, 2Б-уй. Физика-техника институти. Тел./факс: (+99871) 235-30-41.

Диссертация автореферати 2018 йил «____» куни тарқатилди.

(2018 йил «____» ____ даги ____ ракамли реестр баённомаси)

Н. Р. Авезова

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш раиси, т.ф.д.

О.А. Абдулхаев

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш илмий котиби, ф.-м.ф. фалсафа доктори

А. Абдурахманов

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш кошидаги илмий семинар раиси, т.ф.д., профессор

КИРИШ (фан доктори (DSc) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Бугунги кунда жахон амалиётида яримўтказгичлар сохасидаги истикболли йўналишлардан А^{II}В^{VI} бинар $A^{III}B^{V}$ бv ва бирикмаларини чиқишни бири ишлаб арзонлаштириш мақсадида уларни кремний (Si) технологияси билан Бу йўналишда элементар интеграциясини амалга оширишдан иборат. $A^{II}B^{VI}$ $A^{III}B^{V}$ яримўтказгичлар хамда ва бирикмаларининг каттик коришмаларини Si тагликларига ўстириш, уларнинг структуравий ва фотоэлектрик хоссаларини ўрганиш жуда мухим хисобланади. Ушбу қаттиқ қоришмалар кейинги йилларда турли асбобларда кенг қўлланилмоқда жумладан, улар асосан бошка яримўтказгич материалининг юпка катламини Si таглик билан мослаштирувчи оралик катлам сифатида хамда зарур параметрларга эга бўлган фаол материал сифатида кўлланилмокда. Шу боисдан Si тагликларига икки ва кўп таркибли яримўтказгичли қаттиқ қоришмаларнинг эпитаксиал қатламларини ўстириш ва улардаги икки атомли (молекулали) киритмаларнинг ўзаро таъсирини ўрганиш хозирги замон яримўтказгичлар физикасининг долзарб вазифаларидан бири хисобланади.

Хозирги кунда жахонда молекулали киритмаларни яримўтказгичларнинг ўрганишга фотоэлектрик ва оптик хоссаларига таъсирини хамда яримўтказгичларнинг параметрларига боғлиқ холда ушбу молекулали киритмалар энергетик сатхлари табиатини очиб беришга катта эътибор қаратилмоқда. Шу боисдан яримўтказгичлар асосидаги структураларнинг фотосезгирлик оралиғини молекулали киритмалар ёрдамида бошқариш, молекулали киритмалар иштирокида кечадиган фотовольтаик жараёнлар механизмини очиб бериш, асос яримўтказгичнинг параметрларига боғлик холда молекулали киритмаларнинг энергетик сатхларини юзага келиш конуниятларини аниклаш долзарб хисобланади.

Республикамизда илм-фан ривожига, жумладан, янги турдаги кўп функционалли яримўтказгичли материалларни олиш технологиясини ривожлантиришга алохида эътибор каратилмокда. Бу борада мамлакатимиз олимлари томонидан Si тагликларига юза қатламида тўлиқ германий, галлий арсениди, галлий фосфоридан иборат бўлган эпитаксиал қатламларни олиш технологиясини ишлаб чикишда мухим ахамиятга эга бўлган натижалар олинган. Ўзбекистон Республикасини 2017-2020 йилларда ривожлантириш стратегиясига асосан «принципиал жихатдан янги махсулот ва технология турларини ўзлаштириш, шу асосда ички ва ташки бозорларда миллий товарларнинг ракобатбардошлигини таъминлаш»¹ вазифалари белгилаб берилган. Бу борада молекулали киритмаларни куллаган холда фотоэлектрик хоссалари бошкарилувчи янги ва арзон яримўтказгичли материалларни яратиш асосида электрон саноат махсулотларининг самарадорлигини ва рақобатбардошлигини ошириш мухим ахамиятга эга.

¹ Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ–4947-сон «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги Фармони.

Узбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 13 февралдаги ПҚ-2772-сон «2017-2021 йилларда электротехника саноатини бошқаришни янада такомиллаштириш, жадал ривожлантириш ва диверсификация килиш чора-тадбирлари тўғрисида»ги, 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон «Фанлар Академияси фаолияти, илмий тадкикот ишларини ташкил этиш, бошкариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида»ги ва 2018 йил 14 июлдаги ПК-3855-сон «Илмий ва илмийтехникавий фаолият натижаларини тижоратлаштириш самарадорлигини ошириш бўйича қўшимча чора-тадбирлар тўғрисида»ги Карорлари хамда бошқа мазкур фаолиятга тегишли меъёрий-хукукий хужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадкикоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот иши Ўзбекистон Республикасининг фан ва технологиялар ривожланишининг III. «Энергетика, энергия ва ресурс тежамкорлиги, транспорт, машина ва асбобсозлик, замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника ва электрон асбобсозликни ривожлантириш» устувор йўналишига мувофик бажарилган.

Диссертация мавзуси бўйича халкаро илмий тадкикотлар шархи². Яримўтказгичли каттик коришмаларни ўстириш ва улардаги киритмаларнинг ўзаро таъсирини ўрганиш бўйича илмий тадқиқотлар жахоннинг етакчи халқаро илмий марказлари ва олий таълим муассасалари, жумладан, Массачусетс технология институти, Огайо давлат университети, Стенфорд университети, Иллинойс университети, NASA Glenn тадкикот маркази (АҚШ); Лидс университети, Электроника ва электротехника мактаби (Англия); Яримўтказгичлар технологияси институти, Штутгарт университети, Рейн-Вестфальт Ахена техника университети (Германия); Минералогия ва кристаллография – CNRS лабораторияси, Магнит майдон импульслари Миллий лабораторияси (Франция); А.Ф. Иоффе номидаги Физика-техника институти ва А.В. Ржанов номидаги Яримўтказгичлар физикаси институти (Россия); Тоёхаши технология университети, Интеграллашган квант электроникаси тадкикот маркази, Хоккайдо университети (Япония); Чьяотун Миллий университети (ХХР); Физика-техника институти, Андижон давлат университети (Ўзбекистон)да олиб борилмокда.

² Диссертация мавзуси бўйича халкаро илмий-изланишлар шархи Molecular Beam Epitaxy of III-P_yAs_{1-y} Solid Solutions: Mechanism of Composition Formation in the Sublattice of a Group V Element // Semiconductors, 2015, Vol. 49, No. 2, pp. 157–165., Peculiarities of the optical properties of wide-gap II-VI compounds with Mg isovalent impurity // Telecommunication and Radio Engineering. - 2014. Vol. 73. No.10. pp. 909-914., Application of microsize light-emitting diode structure for monolithic optoelectronic integrated circuits // Phys. Stat. Sol. (a), 2007, Vol. 204, No.6, pp.2082–2086., High-speed GaAs metal gate semiconductor field effect transistor structure grown on a composite Ge/Ge_xSi_{1-x}/Si substrate // J. Appl. Phys. 2007, 101, pp. 084501-1 – 084501-6., Optical critical points of thin-film Ge_{1-y}Sn_y alloys: A comparative Ge_{1-y}Sn_y/Ge_{1-x}Si_x study // Physical Review B. 2006. Vol.73, pp. 125207-1–125207-16., Tin-Based Group IV Semiconductors: New Platforms for Opto- and Microelectronics on Silicon // Annual Review of Materials Research. 2006, Vol. 36, pp. 497-554., Fundamental Studies of P(GeH₃)₃, As(GeH₃)₃, and Sb(GeH₃)₃: Practical n-Dopants for New Group IV Semiconductors // Chem. Mater., 2006, Vol. 18, No. 26, pp. 6266-6277. ва бошка манбаалар асосида бажарилган.

Жаҳонда яримўтказгичли қаттиқ қоришмаларни ўстириш ва улардаги киритмаларнинг ўзаро таъсирини тадқиқ қилиш йўналишида қатор, жумладан, қуйидаги натижалар олинган: Si тагликларига ўстирилган Si_{1-x}Ge_x буфер қатламининг мукаммаллигига таркибий қисмининг таъсирини тадқиқ қилиш бўйича Ge атомлари концентрациясининг қатлам бўйича ўзгариши 10% Ge/мкм бўлганда, дислокациявий нуқсонлар зичлиги $2 \cdot 10^6$ см⁻² дан ошмаслиги аниқланган (Япония, АҚШ); Pb_{1-y}Sn_yTe<In> қаттиқ қоришмалардаги In киритмалари бўйича олиб борилган тадқиқотлар натижасида y > 0.29 бўлганда In нинг энергетик сатҳи қаттиқ қоришманинг валент зонасида ётиши аниқланган (Россия); GaAs ни ZnSe молекулалари билан легирлаш бўйича олиб борилган тадқиқотлар катида) GaAs да бир атомли ёки уч атомли ((Se-Zn₂Ga₂)⁻, (Zn-Se₂As₂)⁺) легирлашга қараганда турғунроқ бўлиши ва эркин заряд ташувчиларнинг кўплаб киритилишига имкон туғдириши аниқланган (АҚШ).

Хозирги пайтда дунёда яримўтказгичли каттик коришмаларнинг таркибий қисмлари ва улардаги киритмаларнинг ўзаро таъсирини ўрганиш бўйича Si тагликларига дислокациявий нуксонларнинг зичлиги 2·10⁶ см⁻² дан $A^{III}B^{V}$. $A^{II}B^{VI}$ бирикмалари ва бўлмаган уларнинг юкори каттик қоришмаларининг монокристалл қатламларини ўстириш, яримўтказгичли бирикмалари асосидаги оптоэлектрон асбобларни бинар кремний технологияси билан монолит интеграциясини амалга ошириш, молекулали яримўтказгичлардаги холатини ўрганиш, киритмаларни изовалент киритмаларни каттик коришмаларнинг хоссаларига таъсирини аниклаш билан боғлиқ бўлган устувор йўналишларда тадкикотлар олиб борилмокда.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Икки атомли (молекулали) киритмаларни яримўтказгичли материалларнинг фотоэлектрик хоссаларига таъсири, шунингдек, валент зона ичида локаллашган энергетик сатхга эга бўлган изовалент киритмалар кам ўрганилган. Бу борада АҚШ олимлари Л.Г.Ванг ва Алекс Зунгер псевдопотенциал ясси тўлкинлар бўйича олиб борган хисоб-китоблари асосида GaAs панжарасидаги Zn-Se ковалент боғининг узунлиги ва хосил бўлиш энтальпияси Zn атомининг ёки Se атомининг атрофига боғлиқ эканлигини аниқлашган. Бундан ташқари Zn-Se боғининг узунлиги ($R_{\text{Zn-Se}}$) соф ZnSe бирикмада $R_{\text{Zn-Se}} = 2.42$ Å бўлишини эътиборга олиб, GaAs нинг тетраэдрик панжарасида Zn-Se₄ кластерда R_{Zn-Se} = 2.44 Å, Zn-Se₃As кластерда $R_{Zn-Se} = 2.46$ Å, Zn-Se₂As₂ кластерда $R_{Zn-Se} = 2.49$ Å, Zn-SeAs₃ кластерда эса $R_{\text{Zn-Se}} = 2.51$ Å эканлигини аниклаштирган холда, киритма ZnSe молекулалари атрофида As атомлари қанча кўп бўлса, Zn-Se боғининг узунлиги шунча катта бўлишини кўрсатишган. Лекин GaAs панжарасига киритилган ZnSe молекулаларининг энергетик сатхи ва уларнинг жойлашиш ўрни ҳамда GaAs панжарасини Zn-Se ковалент боғи узилиш энергиясига таъсири ўрганилмаган. Украина олимлари В.П. Махний бошкалар Se. S каби изовалент киритмалар ZnO ва Te. нинг фотолюминесценция кобилиятини ошишига олиб келишини хамда изовалент киритмаларнинг электрманфийлиги ўрни эгалланаётган атомнинг

7

электрманфийлигидан катта бўлганда киритма атомлари электронни боғлаб олиб акцептор бўлишини, акс холда, улар ковакларни боғлаб олиб донор бўлишини аниклашган. Бирок изовалент атомларнинг энергетик сатхлари хамда икки атомли изовалент киритмаларнинг таъсири ўрганилмаган. Рус олимлари А.В. Марченко ва бошқалар PbS_zSe_{1-z} қаттиқ қоришмада киритма марказлари орасидаги электрон айирбошлашни ўрганиб, Sn атомлари PbS₇Se₁₋₇ да изовалент киритма сифатида Pb атомлари ўрнини эгаллаши ва нейтрал Sn²⁺ хамда икки карра ионлашган Sn⁴⁺ донор холатларга эга бўлишини аниқлашган. Киритма Sn атомлари энергетик сатхининг жойлашиш ўрни PbS_zSe_{1-z} қаттиқ қоришманинг таркибига боғлиқ бўлиши, яъни $z \ge 0.5$ бўлганда у таъкикланган зонанинг пастки ярмида, $z \le 0.4$ бўлганда эса валент зонанинг ичида жойлашишини аниклашган. Бу тадкикот ишларида хам икки атомли (молекулали) киритмаларнинг таъсири ўрганилмаган.

Ўзбекистонлик олимлар М.С. Саидов ва А.С. Саидовлар томонидан киритма молекулалари атомлари ковалент боғининг узилиш энергияси яримўтказгичнинг таъқиқланган зонаси кенглигидан катта бўлганда, бу молекулаларнинг энергетик сатҳи валент зонада жойлашиши мумкинлиги назарий жиҳатдан башорат қилинган ҳамда Ge₂ молекуласининг GaAs даги энергетик сатҳи 77 К ҳароратда GaAs нинг ўтказувчанлик зонаси тубидан 0.9 эВ пастда жойлашиши тажрибада аниқланган. А.С. Саидов раҳбарлигида бир қатор қаттиқ қоришмалар, жумладан, $(Si_2)_{1-y}(GaAs)_y$, $(Si_2)_{1-y}(GaSb)_y$, $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$, $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ лар ўстирилган, бироқ улардаги молекуляр киритмаларнинг ҳолатлари ўрганилмаган.

Киритмаларнинг ярим ўтказгичлардаги холатини ўрганиш бўйича шу кунга қадар олиб борилган тадқиқотларнинг кўплигига қарамасдан, икки атомли (молекулали) киритмаларни, айниқса, кенг зонали яримўтказгичларнинг молекулаларини тор зонали яримўтказгичларнинг фотоэлектрик хоссаларига таъсири, бундай киритмаларнинг энергетик сатҳлари ҳамда асос яримўтказгич параметрлари (таъқиқланган зона кенглиги, панжара доимийси)ни киритма молекулалари атомларининг боғланиш энергиясига таъсири бўйича бир қатор муҳим масалалар ҳал этилмаганлигича қолмоқда.

Тадкикотнинг диссертация бажарилган илмий-тадкикот муассасаси илмий-тадкикот ишлари режалари билан боғликлиги. Диссертация тадкикоти Физика-техника институти фундаментал илмий-тадкикот ишлари режасининг ФА-Ф2-Ф030+Ф096 «ZnS, ZnSe, ZnTe, GaSb, Si, Ge, SiC асосида каттик коришмаларни ўстириш ва уларнинг фотоэлектрик ва люминесцент хусусиятлари» (2007–2011 й.й.); Ф2-ФА-0-43917 «Si, Ge, GaSb, InSb, GaP, GaAs, ZnSe, ZnS, SiC, олмос асосидаги янги каттик коришмаларнинг ва гетероструктураларнинг нанонуксонлари, вольтаик, нурланиш хусусиятлари» (2012–2016 й.й.) илмий лойихалари доирасида бажарилган.

Тадкикотнинг максади параметрлари асос яримўтказгич таъсирида ўзгарувчи Si₂, GaAs, CdS ва ZnSe киритма молекулаларидан фойдаланган холда Si, Ge, Sn, GaAs, GaSb, InSb, ZnSe ва CdS асосида яратилган каттик

қоришмаларнинг электрофизик ва люминесцент хусусиятларини аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

суюқ фазадан Si (111) тагликларига $(Si_2)_{1-y-z}(Ge_2)_y(GaAs)_z$, $(Si_2)_{1-y-z}(GaSb)_y(GaAs)_z$, $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$, $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ эпитаксиал қатламларининг ва GaAs (100) тагликларга (InSb)_{1-y}(Sn_2)_y, (GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y эпитаксиал қатламларининг узлуксиз қаттиқ қоришмаларини ўстириш;

p-GaAs-n-GaAs<Si₂> структураларини олиш;

(GaAs)_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> ва (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} қаттиқ қоришмаларининг люминесцент хусусиятларига Si₂ ва ZnSe молекулаларининг таъсирини аниқлаш;

p-GaAs–*n*-GaAs<Si₂> структураларда заряд ташувчиларнинг фото- ва иссиклик генерациясига Si₂ молекулаларининг таъсирини аниклаш;

p-Si–n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) ва p-Si–n-(Si₂)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn₂)_z ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) структуралари фотосезгирлигининг спектрал ўзгаришига CdS ва SiC молекулаларининг таъсирини аниклаш;

GaAs молекулаларининг $(Si_2)_{1-y}(GaSb)_y$ ва $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$ қаттиқ қоришмалардаги энергетик сатҳларини баҳолаш;

элементар яримўтказгич ва А^ШВ^V бирикмаларининг таъқиқланган зонаси кенглигини панжара доимийси, молекулалари атомларининг ковалент радиуслари йиғиндиси ва электрманфийликларининг фарқи бўйича ўзгаришини кўрсатиш.

Тадкикотнинг объекти $(Si_2)_{1-y-z}(Ge_2)_y(GaAs)_z$, $(Si_2)_{1-y}(GaSb)_y$, $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$, $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$, $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$, $(GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y$ каби қаттиқ қоришмалар ва улар асосидаги *p*–*n*-гетероструктуралардан иборат.

Тадқиқотнинг предмети элементар яримўтказгичлар ҳамда A^{III}B^V ва A^{II}B^{VI} бирикмалари асосида молекулали ўрин алмашиниш натижасида ҳосил бўлган қаттиқ қоришмаларнинг таркибий қисмлари ва улардаги молекулали киритмаларнинг ўзаро таъсири ҳамда улар асосида яратилган гетероструктураларнинг ҳусусиятларидан иборат.

Тадқиқотнинг усуллари. Тадқиқотни амалга оширишда рентгенли микрозонд таҳлили, рентген нурларининг дифракцияси, фотолюминесценциянинг спектрал ўзгариши, фотосезгирликнинг спектрал ўзгариши, Холл услуби ҳамда яримўтказгичларда ток ташиш меҳанизмларини таҳлил қилишнинг замонавий тадқиқот усулларидан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

илк бор GaAs молекулаларини Si таглик билан унинг устига ўстирилган GaSb эпитаксиал қатлами панжара доимийларини бир-бирига мослаштириши ҳамда (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> қаттиқ қоришманинг валент зонасида жойлашган энергетик сатҳ $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ эВ ҳосил қилиши ва улар асосидаги *p*-*n*-структураларнинг фотонлар энергияси $E_{ph} \ge 1.2$ эВ бўлганда фотосезгирлигини ошириши кўрсатилган;

77 К хароратда Si₂ молекулаларини GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> қаттиқ қоришманинг ўтказувчанлик зонаси тубидан 1.33 эВ пастда таъқиқланган

зонада жойлашган энергетик сатҳ ҳосил қилиши ҳамда қаттиқ қоришма панжарасидаги Si-Si ковалент боғларининг узилиш энергияси, уларнинг одатдаги Si панжарасидаги қийматидан 0.17 эВ га ортиши кўрсатилган;

илк бор *p*-GaAs–*n*-GaAs<Si₂> структурада киритмали ютилиш соҳасида 1.31 эВ энергияли фотонларда Si₂ молекулаларининг киритмали сатҳлари иштирокида фото ва иссиҳликнинг биргаликдаги таъсири остида электронлар ва ковакларнинг генерацияси натижасида фототок ҳосил бўлиши – янги фотоиссиҳликвольтаик эффекти аниҳланган;

илк бор CdS ва SiC молекулалари $(Si_2)_{0.99}$ (CdS)_{0.01} хамда $(Si_2)_{0.96}$ (SiC)_{0.033}(Sn₂)_{0.007} каттик коришмаларида валент зонада жойлашган энергетик сатҳларни $E_{i,CdS} = E_C - 2.2$ эВ ва $E_{i,SiC} = E_C - 2.0$ эВ ҳосил қилиши ва $E_{ph} \ge 2.0$ эВ энергияли фотонларда кремнийли *p-n*-структураларнинг фотосезгирлигини ошириши кўрсатилган;

илк бор тор зонали яримўтказгичлар асосида олинган қаттиқ қоришмаларда кенг зонали яримўтказгичларнинг икки атомли молекулалари (GaAs, ZnSe)дан фойдаланиш валент зонада жойлашган энергетик сатх (E_i) ларни ((InSb)_{0.95}(Sn₂)_{0.05} да $E_{i,GaAs} = E_C - 1.0$ эВ; (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} да $E_{i,ZnSe} = E_V - 1.16$ эВ) хосил қилиши аниқланган;

илк бор 5 К ҳароратда GaAs панжарасидаги Zn-Se ковалент боғларининг узилиш энергияси, уларнинг одатдаги ZnSe панжарасидаги қийматидан 0.14 эВ га камайиши аниқланган;

илк бор тажриба натижаларига таянган холда Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb асосидаги қаттиқ қоришмаларда киритма GaAs молекулаларининг ионланиш энергияси ($E_{i,GaAs}$)ни таъқиқланган зона кенглиги (E_g) ва кристалл панжара доимийси (a) бўйича ўзгаришининг эмперик формулалари ($E_{i,GaAs}$ (эВ) = 0.98 (эВ) + 0.31× E_g (эВ); $E_{i,GaAs}$ (эВ) = 4.27 (эВ) – 0.50 (эВ/Å)×a(Å)) аниқланган;

А^ШВ^V бирикмалар молекулаларининг умумлашган моментлари учун мавжуд ифодалардан фарқли, нафақат атомларнинг ковалент радиусларини, электрон қобиқлари тузилишини ва ядронинг эффектив зарядини, балки атомларнинг электрманфийлигини ҳам ҳисобга олувчи такомиллашган ифода аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

Si (111) тагликларига GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> қаттиқ қоришмасининг эпитаксиал қатламлари олинган бўлиб, улар Si тагликларига GaAs нинг эпитаксиал қатламларини ўстиришда оралиқ қатлам сифатида қўлланиши мумкинлиги ва бу ўз навбатида GaAs ва унинг қаттиқ қоришмалари асосида ишлаб чиқарилувчи яримўтказгичли асбобларнинг таннархини пасайишига олиб келиши кўрсатилган;

Si (111) тагликларига (GaSb)_{0.925}(Si₂)_{0.075}<GaAs> қаттиқ қоришмасининг эпитаксиал қатламлари олинган бўлиб, улар Si тагликларга GaSb нинг эпитаксиал қатламларини ўстиришда оралиқ қатлам сифатида қўлланиши мумкинлиги ва бу ўз навбатида термофотовольтаик тизимлар учун GaSb ва унинг қаттиқ қоришмалари асосида ишлаб чиқарилувчи фотоэлементларнинг таннархини пасайишига олиб келиши кўрсатилган; фотонлар энергияси $E_{\rm ph} \ge 2.2$ эВ бўлганда юқори фотосезгирликка эга бўлган p-Si–n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) гетероструктураси ишлаб чиқилган, бу ўз навбатида юқори хароратларда (~ 70-80°С) хам самарадор ишловчи қуёш элементларини ишлаб чиқиш имконини бериши кўрсатилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги ишда замонавий илмий тадқиқот услубларидан, стандарт технологик қурилма ва ўта аниқ ишловчи ускуналардан, намуналарнинг электрофизик параметрларини ўлчашда стандарт ўлчов асбобларидан фойдаланилгани, тажрибаларнинг зарурий статистикаси, тажрибаларда олинган натижаларнинг назарий таҳлилларга мос келиши, олинган натижаларни бошқа муаллифлар томонидан олинган натижалар билан мос келиши, олинган натижаларнинг синалган физик моделлар доирасида изоҳлаб берилиши билан таъминланади.

Тадкикот натижаларининг илмий ва амалий ахамияти.

Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти тор зонали яримўтказгичлар асосида яратилган қаттиқ қоришмаларда кенг зонали яримўтказгичларнинг икки атомли киритма молекулаларини энергетик сатҳлари тўғрисидаги янги тасаввурларни яратиш билан, яъни уларнинг энергетик сатҳлари валент зона ичида жойлашиши ҳамда бу молекулалар атомлари ковалент боғининг узилиш энергиясининг камайиши билан аниқланади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти Si тагликларига (Si₂)_{1-yz}(Ge₂)_y(GaAs)_z ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) қаттиқ қоришмаси орқали ўстирилган (GaAs)_{0.95}(Ge₂)_{0.05} қаттиқ қоришмалари А^{III}В^V бинар бирикмалари асосида яратилувчи асбоблар учун таглик сифатида фойдаланиши мумкинлиги ҳамда (Si₂)_{1-y}(GaSb)_y<GaAs> ($0 \le y \le 1$) қаттиқ қоришмалари термофотоэлектрик тизимлар учун GaSb бирикмаси асосида самарадор фотоэлементларни ишлаб чиқишда фойдаланиши мумкинлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Киритма ва қаттиқ қоришма таркибий қисмлари молекулаларининг ўзаро таъсирини ҳамда қаттиқ қоришмали структураларнинг фотоэлектрик хоссаларига киритма молекулаларининг таъсирини аниқлаш асосида:

GaAs молекулаларини Si таглик билан унинг устига ўстирилган GaSb эпитаксиал қатлами панжара доимийларини бир-бирига мослаштириши хамда (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> қаттиқ қоришманинг валент зонасида жойлашган энергетик сатх $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ эВ хосил қилиши ва улар асосидаги *p*-*n*-структураларнинг фотонлар энергияси $E_{ph} \ge 1.2$ эВ бўлганда фотосезгирлигини ошириши конуниятлари Россия Фанлар академияси Физика-техника институтида бажарилган «Наногетероструктурали куёш элементлари ва янги авлод фотовольтаик курилмаларини ишлаб чикиш» фундаментал лойихасида фотоэлементларнинг фотосезгирлик спектрини киска тулкинлар сохаси томон кенгайтиришда кулланилган (Россия Фанлар академияси Физика-техника институтининг 2018 йил 26 апрелдаги 11217-411/01/211.5-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш термофотовольтаик тизимлар учун GaSb бинар бирикмалари асосидаги фотоэлементларни яратиш имконини берган;

77 К хароратда Si₂ молекулаларини GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> қаттиқ қоришманинг ўтказувчанлик зонаси тубидан 1.33 эВ пастда таъқиқланган зонада жойлашган энергетик сатҳни ҳосил қилиши, ҳамда қаттиқ қоришмадаги Si-Si ковалент боғларининг узилиш энергияси, уларнинг одатдаги кремний панжарасидаги қийматидан 0.17 эВ га ортиши қонуниятлари Россиянинг Пенза давлат университетида бажарилган «Яримўтказгич оксидлари асосидаги иерархик наноматериалларнинг фотокаталитик, сенсор ва адсорбцион хоссалари ва улар орасидаги боғланишнинг фундаментал тадқиқотлари» фундаментал лойиҳасида яримўтказгич оксидлари асосидаги қаттиқ қоришмалар зоналари структурасининг хусусиятларини тушунтиришда қўлланилган (Пенза давлат университетининг 2018 йил 18 майдаги 67-367-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш яримўтказгич материалларини ташқи ҳарорат градиенти бўлмаган шароитда қиздириш натижасида ҳосил бўлувчи электр юритувчи кучни тавсифловчи термовольтаик эффектнинг номувозанат термодинамик моделини ишлаб чиқиш имконини берган;

GaAs молекулаларини Si таглик билан унинг устига ўстирилган GaSb эпитаксиал қатлами панжара доимийларини бир-бирига мослаштириши хамда (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> қаттиқ қоришманинг валент зонасида жойлашган энергетик сатҳни $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ эВ, ва Si₂ молекулаларини GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> қаттиқ қоришманинг таъқиқланган зонасида ўтказувчанлик зонадан 1.33 эВ пастда жойлашган энергетик сатхни хосил қилиш конуниятлари «FOTON» акциядорлик жамиятида яримўтказгичли асбобларнинг юпқа қатламларини олиш ва кристалларга ишлов беришда қўлланилган («Узэлтехсаноат» акциядорлик компаниясининг 2018 йил 7 сентябрдаги 02-1982-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш майдон транзисторларининг ток характеристикаларини яхшилаш ва ташки таъсирларга чидамлилигини ошириш имконини берган;

p-GaAs–*n*-GaAs<Si₂> структурасида киритмали ютилиш сохасида 1.31 эВ энергияли фотонларда Si₂ молекулаларининг киритмали сатҳлари иштирокида фото ва иссикликнинг биргаликдаги таъсири остида электронлар ва ковакларнинг генерацияси натижасида фототокнинг хосил бўлиши хамда CdS ва SiC молекулалари (Si₂)_{0.99}(CdS)_{0.01} ва (Si₂)_{0.96}(SiC)_{0.033}(Sn₂)_{0.007} қаттиқ қоришмаларида валент зонада жойлашган энергетик сатҳларни $E_{i,CdS} = E_C - E_C$ 2.2 эВ ва $E_{i,SiC} = E_C - 2.0$ эВ хосил қилиши ва $E_{ph} \ge 2.0$ эВ энергияли фотонларда кремнийли *p-n*-структураларнинг фотосезгирлигини ошириши натижалари «Легирланган кремний сирти ва хажмидаги квант ўлчамли уларнинг *р-п*-структуралардаги эффектлар хамда заряд ташувчилар ва рекомбинация жараёнларига таъсири» фундаментал фотогенерация лойихасида турли киритмалар билан легирланган кремнийли структураларда ток ташувчиларнинг кўчиш жараёнларини тавсифлашда кўлланилган (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2018 йил 5 майдаги 89-03-1717-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш легирланган кремний сирти ва *р-п*-структураларда кечувчи фотовольтаик иссикликвольтаик эффектларининг хусусиятларини ва аниқлаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Тадқиқотнинг асосий натижалари 9 та халқаро ва 6 та республика илмий-амалий анжуманда муҳокамадан ўтказилган.

Тадкикот натижаларининг эълон килинганлиги. Диссертация мавзуси бўйича жами 27 та илмий иш чоп этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 12 та мақола, жумладан 10 таси хорижий халқаро журналларда нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, бешта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхати ва иловалардан иборат. Диссертация матни 180 бетда келтирилган.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, муаммонинг ўрганилганлик даражаси очиб берилган, тадқиқотнинг мақсади ва вазифалари, объекти, предмети ва услуби тавсифланган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, тадқиқот натижаларини амалиётга жорий қилиш, ишнинг апробацияси, нашр этилган ишлар, диссертациянинг ҳажми ва тузилиши бўйича маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг «Яримўтказгичли каттик коришмаларни суюк фазали эпитаксияси, уларнинг кўлланилиши ва улардаги киритмаларнинг ўзаро таъсирини аниклашнинг хозирги кундаги холати» деб номланган биринчи бобида кўп таркибли тизимларда атомларнинг ўзаро таъсирлашуви ва кимёвий элементлар даврий тизимининг IV гурух элементларини А^ШВ^V ва А^ШВ^{VI} бирикмалар билан қаттиқ қоришмалар (ҚҚ) хосил қилиши борасидаги назарий ва тажрибавий тадқиқотларнинг хозирги вақтдаги холати хамда уларни амалда қўллаш; Si тагликлари билан А^ШВ^V ва $A^{II}B^{VI}$ типидаги яримўтказгичларнинг эпитаксиал катламлари параметрларини мувофиклаштириш учун Si тагликларда дислокациявий нуқсонларининг зичлиги 2·10⁶ см⁻² дан юқори бўлмаган буфер қатламларини олиш; оптоэлектрон асбобсозлиги учун мухим бўлган баъзи бир ҚҚларни ўстириш хамда уларнинг структуравий ва электрофизик хусусиятларини ўрганиш; А^ШВ^V, А^ШВ^{VI} ярим ўтказгич бирикмалар ва улар асосидаги ҚҚларнинг юпқа қатламлари технологиясини Si технологияси билан уйғунлаштириш; икки таркибли яримўтказгичли ва кўп ККлардаги киритмаларнинг ўзаро таъсири бўйича адабиётлар тахлили келтирилган.

«Si тагликларда олинган (Si₂)_{1-у-z}(Ge₂)_у(GaAs)_z қаттиқ қоришмалар асосидаги структураларнинг фотоэлектрик, фотоиссиқликволтаик ва люминесцент хоссалари» деб номланган иккинчи бобда Si (111) тагликларда суюқ фазали эпитаксия усули билан таркиби Pb–Si–Ge–GaAs бўлган чегараланган ҳажмли қўрғошинли қоришма-эритмадан (Si₂)_{1-уz}(Ge₂)_у(GaAs)_z ҚҚларини олиш ҳамда уларнинг люминесцент ва фотоэлектрик хоссаларини ўрганиш бўйича ўтказилган тадкикот натижалари келтирилган. Олинган ҚҚларни рентгенли микротахлил қилиш натижалари (1-расм) эпитаксия бошида Si тагликда Si тагқатлам ўсишини, кейинчалик, қатламнинг қалинлиги ошиб бориши билан юпқа қатлам таркибида Si атомлари концентрациясининг бир меъёрда камайиб, Ge нинг эса ошиб боришини кўрсатди. Юпқа қатламнинг қалинлиги ~ 10 мкм бўлганда Ge нинг концентрацияси 25 мол.% га етади, GaAs нинг микдори эса 1 мол.% дан ошмайди. Қоришма-эритма янада совитилганда, у GaAs бўйича хам тўйинишга эришади, буни қатламнинг қалинлиги ортиши билан Ge атомларининг концентрацияси ошиши бараварида, GaAs молекулаларининг хам ортишидан кузатиш мумкин, бунда кристалл панжаранинг тугунларини Ge атомлари кўпрок эгаллайди. Юпка катламнинг калинлиги ~ 18 мкм бўлганда Ge ~ 91 мол.%, Si 1.4 мол.%, Ga 4.2 мол.% ва As 3.4 мол.% ни ташкил қилади, яъни ҚҚнинг $(Si_2)_{1-v-z}(Ge_2)_v(GaAs)_z$ $(0.25 \le y \le 0.91, 0 \le z \le 0.91)$ 0.076) тагкатлами хосил бўлади. Кейинчалик кристалл панжаранинг Ge тугунларини GaAs молекулалари интенсив эгаллай бошлайди. Юпқа қатламнинг қалинлиги ~ 32 мкм бўлганда GaAs нинг концентрацияси 94 мол.% гача етади, Si эса ~ 1 мол.% ни ташкил қилади. Юпқа қатламнинг қалинлиги 18 дан 32 мкм гача бўлган оралиқда $(Ge_2)_{1-v-z}(GaAs)_v(Si_2)_z$ $(0.09 \le y)_v(Si_2)_z$ $\leq 0.94, 0.02 \leq z \leq 0.01$) ҚҚдан иборат ўтиш қатлами хосил бўлади. Юза қатлам GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> ҚҚдан иборат бўлиб, бу қатламда Si нинг моляр микдори 0.8% дан кичик, яъни Si бунда киритма вазифасини ўтайди.



1-Si, 2-Ge, 3-Ga, 4-As. **1-расм.** (Si₂)_{1-x-y}(Ge₂)_x(GaAs)_y (0≤x≤0.91; 0≤y≤0.94) ҚҚ қатламида атомлар тақсимоти профили



1 − *n*-Si–*p*-(Si₂)_{1-y-z}(Ge₂)_y(GaAs)_z ($0 \le y \le 0.91$, $0 \le z \le 0.94$), 300 K 2 − *n*-Si–*p*-(Si₂)_{1-y-z}(Ge₂)_y(GaAs)_z ($0 \le x \le 0.91$, $0 \le y \le 0.94$), 77 K 3 − *p*-Si–*n*-Si, 300 K.

2-расм. Спектрал фотосезгирлик

p-қатламининг қалинлиги ~ 25 мкм бўлган n-Si-p-(Ge₂)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si₂)_z ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) гетероструктуранинг ва диффузиявий n-Si қатламининг қалинлиги ~ 1 мкм бўлган p-Si-n-Si структуранинг фототокини унинг максимал қийматига нисбати ($I_{ph}/I_{ph, max}$) билан аниқланган спектрал фотосезгирликларнинг (2-расм) 300 ва 77 К ҳароратларда фотонлар энергияси (E_{ph})га боғлиқлиги тадқиқ қилинди. 2-расмдан n-Si-p-(Ge₂)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si₂)_z гетероструктуранинг спектрал сезгирлик соҳаси (1-эгри чизиқ) p-Si-n-Si структуранинг спектрал сезгирлик соҳасига (3-эгри чизиқ) нисбатан узун тўлқинлар томонга силжиганини кўриш мумкин. Бу ҳолат таъқиқланган зона кенглиги (E_g) Si нинг E_g сидан кичик бўлган Ge билан бойиган (1-расм) ҚҚ тагқатлами-

ни фотогенерация жараёнида фаол катнашишидан далолат беради. 2-расмдан кўринадики, n-Si-p-(Ge₂)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si₂)_z гетероструктуранинг фотосезгирлиги 77 К хароратда $E_{\rm ph} = 1.21$ эВ дан бошлаб кескин оша бошлайди ва $E_{\rm ph} = 1.69$ эВ да ўзининг максимал қийматига эришади. Сўнгра (Ge₂)_{1-yz}(GaAs)_y(Si₂)_z ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) юпқа қатламнинг қалинлиги бўйича ҚҚнинг таркиби турлилиги туфайли вужудга келадиган 1.55 эВ да букилиш, 1.88 ва 2.06 эВ ларда эса максимумлар кузатилади. 1.69 эВ даги максимум Ge таъсирида ва 1.77 – 1.88 эВ сохадаги кўтарилиш Si ҳисобига, $E_{\rm ph} \ge 2$ эВ да эса GaAs ҳисобига ҳосил бўлади.

 $(Ge_2)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si_2)_z$ ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) ҚҚ фотолюминесценция (ФЛ)сининг спектри (3-расм) тадқиқ қилинган. Фотоуйғотиш 77 К да GaAs нинг хусусий ютиш сохасига мос кизил лазер нури ёрдамида амалга оширилган. Юпка катламнинг 10 мкм гача калинликдаги юза кисми GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> ҚҚсидан иборат. ФЛнинг спектри 0.855 мкм, яъни E_{ph} = 1.45 эВ да максимум ("чўққи")га эга бўлиб, 0.81 дан 1.08 мкм гача бўлган нурланиш оралиғини қамраб олади. Бу "чўққи"га Eg си 77 К да $E_{
m g,GaAs}$ =1.51 эВ дан кичик ва $E_{
m g,Si}$ = 1.16 эВ дан катта бўлган GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> ҚҚдаги заряд ташувчиларнинг зона-зоналик рекомбинация нурланиши мос келади. $\Phi \Pi$ спектрида $\lambda = 0.933$ мкм да нисбатан юкори бўлмаган, бироқ етарли даражада кенгликка эга бўлган $E_{\rm ph} = 1.33$ эВ га мос келувчи «чўққи» кузатилди. Кенг спектр таркибида бундай "чўққи"нинг мавжудлиги Si₂ (*E*_{*i*,Si₂}) молекулалари ҚҚнинг таъқиқланган зонасида энергетик сатхларнинг ёйиқ тасмасини хосил қилишидан далолат беради (4расм). Маълумки, юпка катламга тушаётган нур юза катламнинг ~ 3 мкм калинлик сохасида ютилади, у холда люминесцент нурланиш асосий таркиб кисм GaAs дан иборат бўлган тагкатламда содир бўлади. Бу тагкатламда Si нинг микдори 0.8 мол.% дан кичик, демак, $E_{\rm ph} = 1.33$ эВ даги энергетик сатхларнинг ёйиқ тасмаси GaAs билан бойиган тагқатлам ҚҚ кристалл панжарасида жойлашган Si-Si ковалент боғлари иштирокида ўтадиган заряд ташувчиларнинг нурланиш рекомбинацияси туфайли хосил бўлади. Соф Si нинг кристал панжарасида жойлашган Si-Si ковалент боғларининг узилиш энергияси 77 К да 1.16 эВ ни ташкил қилади. Бироқ Si-Si боғлари нисбатан кучли боғланган GaAs молекулаларининг атомлари қуршовида жойлашган холда Si₂ ва GaAs молекулалари атомлари электрон кобикларининг гибридизацияси хисобига Si-Si ковалент боғнинг узилиш энергияси 77 К да $E_i = 1.33$ эВ гача кучаяди. Шундай килиб, Si-Si ковалент боғнинг узилиш энергияси уни ўраб турган GaAs молекуласининг кучли боғланган атомлари таъсирида 77 К да $\Delta E = E_{i,Si2} - E_{g,Si} \approx 1.33 - 1.16 = 0.17$ эВ га кучаяр экан.

Si₂ киритмаларини GaAs нинг фотоэлектрик хоссаларига таъсирини аниклаш мақсадида Si₂ билан легирланган GaAs қуёш элементлари (ҚЭ) фотосезгирлигини спектрга боғликлиги ва фототокнинг хароратга боғликлиги тадқиқ қилинди. Шу мақсадда *n*-GaAs тагликларда суюқ фазали эпитаксия ва сўнгра газ фазали цинк (Zn) диффузияси усуллари билан энергетик диаграммаси 5-расмда кўрсатилган *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂>–*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структураси олинди. Шунингдек, таққослаш ва Si₂ киритмасини GaAs хоссаларига таъсирини аниклаш максадида факатгина газ фазадан Zn ни диффузия килиб олинган назорат *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Zn>–*p*-AlGaAs<Zn> структуралари хам тадкик килинди.





3-расм. 77 К да (Ge₂)_{1-у-z}(GaAs)_y(Si₂)_z (0 ≤ y ≤ 0.91; 0 ≤ z ≤ 0.94) ҚҚнинг спектрал фотолюминесценцияси



Тадқиқ қилинган ҚЭлар фотосезгирлигини спектрга боғлиқлигининг таҳлили Si₂ киритмали структураларнинг сезгирлик чегараси $E_{\rm ph} \approx 1.30$ эВ дан бошланиб, сезгирлиги $E_{\rm ph} \approx 1.38$ эВ дан бошланадиган назорат структураларига нисбатан паст энергияли фотонлар соҳаси томонига силжиганини кўрсатди, бу Si₂ киритмасидаги фотовольтаик эффект ҳисобига юзага келган бўлиши мумкин. 6-расмда турли $E_{\rm ph}$ лардаги қисқа туташув фототоки ($I_{\rm кз}$)нинг ҳароратга боғлиқлиги келтирилган. Хусусий ютиш соҳасида $E_{\rm ph} \ge$ $E_{g,GaAs}$ бўлганда $I_{\rm кз}$ деярли ҳароратга боғлиқ бўлмайди (6-расмдаги 5-, 6-эгри чизиқлар). Аксинча, киритмали ютиш соҳасида, $E_{\rm ph} < E_{g,GaAs}$ бўлганда $I_{\rm кз}$ ҳароратга кучли боғлиқ бўлади (6-расмдаги 1-, 2-, 3-, 4-эгри чизиқлар). Бу ҳолат турли ҳароратларда фототокнинг қўшимча ортишини ($I_{\rm ph}/I_{\rm ph}$ (30°С)) спектрга боғлиқлигидан ҳам яққол кўринади (7-расм).



 $1 - hv \ge E_{g,GaAs}$ фотонларни ютиб зона-зоналар бўйича ўтувчи электрон ўтишлар;

2 – hv < E_{g,GaAs} фотонларни ютиб, киритмали сатҳлардан ўтказувчанлик зонасига электронларнинг ўтиши;
 3 – ковакларнинг иссиҳлик генерацияси.

5-расм. *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂>–*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структурасининг энергетик зоналар диаграммаси

7-расмдан кўринадики, $I_{\rm ph}$ нинг максимал ошиши $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ га тўғри келади, $E_{\rm ph} > 1.45$ эВ бўлганда эса $I_{\rm ph}$ нинг ошиши кузатилмайди, бу $E_{\rm ph} \approx$

1.31 эВ атрофида киритмали фотоиссикликволтаик эффект содир бўлишидан далолат беради. $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ бўлганда харорат ортиши билан $I_{\rm ph}/I_{\rm ph(30^{\circ}C)}$ нинг ортиши Si₂ нинг киритма сатҳларидан электронларни ўтказиш зонасига ўтиши (5-расмдаги 2- ўтиш) ва валент зонадан электронларнинг киритма сатҳига ўтиши (5- расмдаги 3-ўтиш) ҳисобига ковакларнинг иссиклик генерацияси туфайли юзага келади. Si₂ киритма сатҳлари иштирокидаги электрон ва ковакларнинг фото- ва иссиклик генерациясининг биргаликдаги таъсири киритмали ютиш соҳасида фототокнинг ортишига олиб келади.



1 – 1.308 эB; 2 – 1.344 эB; 3 – 1.381 эB; 4 – 1.426 эB; 5 – 1.462 эB; 6 – 1.505 эB

6-расм. Фотонлар энергиясининг ҳар ҳил қийматларида *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂> –*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структурасида *I*_{кз} ни ҳарорат бўйича ўзгариши



7-расм. *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂>–*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структурасида фототокни нисбий кўшимча ортишини $I_{\Phi}(t)/I_{\Phi}(30^{\circ}\text{C})$ спектр бўйича ўзгариши

Шундай қилиб, Si тагликларда (Ge₂)_{1-у-z}(GaAs)_y(Si₂)_z ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) ҚҚдан ташкил топган ўтиш қатлами орқали, юпқа қатлам юзасида GaAs нинг миқдори катта бўлган ҚҚни олиш мумкин экан. GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> ҚҚдаги Si₂ молекулаларининг энергетик сатҳи 77 К да ўтказувчанлик зонасидан 1.33 эВ пастда жойлашар экан. Si₂ киритма сатҳлари иштирокидаги электрон ва ковакларнинг фото- ва иссиқлик генерациясининг биргаликдаги таъсири киритмали ютиш соҳасида $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ бўлганда фототок ортишига олиб келади.

Диссертациянинг «Монокристалл Si ва GaAs тагликларда олинган (GaSb)_{1-y-z}(Si₂)_y(GaAs)_z ва (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y каттик коришмалари асосидаги структураларнинг электрофизик ва фотоэлектрик хоссалари» деб номланган учинчи бобида (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> ($0 \le y \le 1$) ва (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y<GaAs> ($0 \le y \le 1$) ва (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y<GaAs> ($0 \le y \le 0.05$) ҚҚлар ҳамда улар асосидаги *p-n*-структураларнинг электрофизик ва фотоэлектрик хоссалари тадқиқ қилинган. (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> ($0 \le y \le 0.05$) ҚҚлар ҳамда улар асосидаги *p-n*-структураларнинг электрофизик ва фотоэлектрик хоссалари тадқиқ қилинган. (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y ҚҚлари (GaSb)_{0.921}(Si₂)_{0.074}(GaAs)_{0.005} буфер қатлами орқали Si (111) тагликларга суюқ фазали эпитаксия усули билан, Sn–GaSb–GaAs–Si–Al таркибли қоришма-эритмадан, кристалланишнинг бошланиш ҳарорати 650°C ва совутиш тезлиги 1 градус/минут бўлган шароитларда ўстирилган. Ўстирилган қатламлар ~ 10 мкм қалинликка, электрон турдаги ўтказувчанликка, ~ 0.01 Ом-см солиштирма қаршиликка ва ток ташувчиларнинг ~ 170 см²/(B·c) холл ҳаракатчанлигига эга бўлди. *p*-Si–*n*-(GaSb)_{1-y}(Si₂)_y ($0 \le y \le 1$) гетероструктураларда ток ўтишини диффузия режими ёндашувида 300 К

хароратда структуранинг асос соҳаси n-(GaSb)_{1-y}(Si₂)_y (0 ≤ y ≤ 1) да асосий бўлмаган ток ташувчилар — ковакларнинг диффузия узунлиги ~ 4 мкм ва яшаш вақтини ~ 2.2·10⁻⁷ с ҳисобланган қиймати баҳоланди.

ҚҚ таркибий қисмларининг аҳамиятини аниқлаш мақсадида p-Si-n-(GaSb)_{1-y-z}(Si₂)_y(GaAs)_z структураси фотосезгирлигини спектрга боғлиқлиги ўрганилди. p-Si таглик ва n-(GaSb)_{1-y}(Si₂)_y эпитаксиал қатлам орасидаги ўтиш соҳасида GaAs нинг миқдори 1 мол.% дан кам, яъни GaAs молекулалари (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y ҚҚда киритма сифатида намоён бўлади. Ўтиш соҳасининг таркиби қатлам қалинлиги бўйича ўзгариб борганлиги сабабли қатламда 3° бурчак остида силлиқланган қия кесим ҳосил қилинди ва ёруғлик зонди ҳар ҳил жойларга туширилиб структуранинг фототоки аниқланди. 8-расмда ёруғлик зонди қия кесимнинг ўрта қисмига тушган ҳол учун структуранинг спектрал фотосезгирлиги келтирилган. Бу жойда таркибий қисмларнинг миқдори GaSb 92.1 мол.%, GaAs 0.5 мол.%, Si₂ 7.4 мол.% дан иборат.

8-расмдан кўриниб турибдики, фотосезгирликни спектр бўйича ўзгариш графигида юкори энергияли фотонлар сохасида $E_{\rm ph} \ge 1.2$ эВ бўлганда чўкки мавжуд. $E_{\rm ph} \ge 1.2$ эВ да сезгирликнинг ошиши GaAs киритма молекулаларига боғлик. Сезгирлик ошишининг узун тўлкинлар сохаси бўйича GaAs молекуласининг киритма сатҳини баҳолаш мумкин ва у $E_{i,GaAs} = 1.2$ эВ га тенг. Маълумки, $E_{g,GaAs} = 1.43$ эВ ва у $E_{g,GaSb} = 0.7$ эВ, $E_{g,Si} = 1.1$ эВ лардан катта. Ga-As атомлари орасидаги ковалент боғ Ga-Sb ва Si-Si атомлар орасидаги ковалент боғдан мустаҳкамроқ. Лекин галлий антимониди кристалл панжарасида GaAs молекуласи GaSb молекуласининг ўрнини эгаллаганда, Ga-As боғланиш, уни ўраб турган GaSb молекулалари атомларининг таъсирида ~ 1.2 эВ гача заифлашади. Натижада (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> ҚҚнинг валент зонасида GaAs нинг киритма сатҳи пайдо бўлади (9-расм).





8 расм. *p*-Si–*n*-(GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> гетероструктурасининг спектрал фотосезгирлиги

9 расм. GaAs молекулаларининг киритмали сатҳига эга бўлган (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> ҚҚсининг энергетик зоналар диаграммаси

Текширилган структуранинг фотосезгирлиги $E_{ph} \approx 1.0$ эВ дан бошланади. Бу ҚҚнинг таъқиқланган зона кенглиги кичик бўлган таркибий қисми – GaSb га боғлиқ. GaSb билан бойитилган тагқатламнинг ёругликни тўлиқ ютмаслигига сабаб унинг юпқалигидир.

(InSb)_{1-у}(Sn₂)_у ҚҚлари GaAs тагликларда суюқ фазали эпитаксия усулида In-InSb-Sn қоришма-эритмадан ўстирилди. Қатламлар 325–250°С харорат оралиғида, қоришма-эритма қалинлиги – 1 мм ва совутиш тезлиги 1

градус/минут бўлганда ўстирилди. Эпитаксиал қатламлар ковак турдаги ўтказувчанликка эга бўлди. Ўстиришнинг дастлабки вақтида қоришма-эритмадан InSb кристаллана бошлайди, чунки танланган ҳароратда эритма InSb билан тўйинган бўлади. Пастроқ ҳароратларда (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y ҚҚнинг ўсишига шароит туғилади, чунки бу ҳароратларда қоришма-эритма индий антимониди ва қалай билан тўйинади. Қоришма-эритмага GaAs қўшилмаганлиги учун таглик индийли қоришма-эритма билан контакт ҳолатига келганда танланган ҳароратда тагликнинг бироз миқдорда эриши юз беради ва бошланғич пайтда кристалланиш фронтида эриган GaAs молекулалари мавжуд бўлади. Ўхшашлик принципидан келиб чиқиб таҳмин қилиш мумкинки, қоришма-эритмани совитиш жараёнида, кристалланишнинг дастлабки пайтларида (GaAs)_{1-v}(InSb)_v ҚҚси кристалланади.

Рентген микротаҳлили ва кўндаланг кесим ҳамда юзадан олинган растр расмларини ўрганиш шуни кўрсатадики, эпитаксия қатламлари метал зарраларидан ҳоли ва юза бўйича (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y ҚҚ таркибий қисмларининг тақсимоти бир хил, ҳажмда эса 0 ≤ х ≤ 0.05 оралиқда ўзгаради.

n-GaAs–*p*-(InSb)_{1-y}(Sn₂)_y ($0 \le y \le 0.05$) гетероструктураларда ток ўтишини диффузия режими ёндошувида 300 К хароратда структуранинг асос сохаси *p*-(InSb)_{1-y}(Sn₂)_y ($0 \le y \le 0.05$) да асосий бўлмаган ток ташувчилар – электронларнинг диффузия узунлиги ~ 4.2 мкм ва улар харакатчанлигини яшаш вақтига кўпайтмасининг қиймати баҳоланди ~ 6.76·10⁻⁶ см²/В.

 $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y < GaAs > ҚҚ таркибий қисмларининг аҳамиятини аниқлаш мақсадида$ *n*-GaAs–*p* $-(InSb)_{1-y}(Sn₂)_y<GaAs> (0<math>\leq$ y \leq 0.05) структурасининг фотосезгирлигини спектрга боғлиқлиги ўрганилди (10 расм). 10-расмдан кўриниб



10-расм. *n*-GaAs–*p*-(InSb)_{1-y}(Sn₂)_y (0≤ *y*≤0.05) структурасининг спектрал фотосезгирлиги турибдики, структуранинг фотосезгирлиги фотонлар энергиясининг 0.3 дан 1.8 эВ гача бўлган оралиғини қамраб олади. Спектрал сезгирлик графигида спектрнинг юқори энергияли фотонлар соҳасида $E_{\rm ph} \ge 1$ эВ бўлганда сезгирлик чўққиси кузатилади. $E_{\rm ph} \ge 1$ эВ бўлганда сезгирлик чўққиси кузатилади. $E_{\rm ph} \ge 1$ эВ бўлганда сезгирликнинг ошиши GaAs таглик ва (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y ҚҚ эпитаксиал қатлами орасидаги ўтиш соҳасида GaAs киритма молекулалари мавжудлиги билан боғлиқ бўлиши мумкин. (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y қатламига яқинроқ соҳада GaAs нинг моляр ҳиссаси 1% дан кам. (GaAs)_{1-y}(InSb)_y<GaAs> ҚҚли ўтиш қатламининг тетраэдрик панжарасида Ga–As,

Ga–Sb, In–As ва In–Sb турдаги боғлар мавжуд. Бу боғларнинг узилиш энергияси мос ҳолда яримўтказгичли бирикмаларнинг таъқиқланган зона кенглиги билан баҳоланади: $E_{g,GaAs} = 1.43$ эB, $E_{g,GaSb} = 0.7$ эB, $E_{g,InAs} = 0.35$ эB ва $E_{g,InSb} = 0.18$ эB. Демак, Ga-As ковалент боғи Ga–Sb, In–As ва In–Sb ковалент боғларига қараганда мустаҳкамроқ. Лекин GaAs молекуласи ҚҚнинг тетраэдрик панжарасида InSb молекулалари қуршовида бўлганда, Ga–As боғланиш энергияси атрофдаги InSb молекулаларининг атомлари

таъсирида ~ 1 эВ гача камаяди ва (InSb)_{1-у}(Sn₂)_у (0 ≤ у ≤ 0.05) ҚҚсининг валент зонасида жойлашган GaAs молекулаларининг киритма сатҳи юзага келади.

Эпитаксиал қатламларининг ёруғликни ютиш коэффициенти (α)ни спектрга боғлиқлиги асосида $\alpha^2 = f(hv)$ функционал боғланишни экстрополяцияси бўйича текширилган ҚҚнинг таъқиқланган зона кенглиги $E_g \approx 0.072$ эВ эканлиги аниқланди. Демак, Sn ҳисобига ҚҚнинг E_g си InSb нинг $E_g = 0.18$ эВ сига қараганда камроқ бўлар экан.

GaAs киритма молекулаларининг ионлашиш энергиясини GaAs, GaSb, InSb каби бирикмалар ва Si, Sn каби элементар яримўтказгичлар асосидаги ҚҚларнинг таъқиқланган зона кенглиги ва панжара доимийсига боғлиқлиги аниқланди. Шу мақсадда GaAs молекулалари билан легирланган p-Si-n- $(GaSb)_{1-v}(Si_2)_v$ (0 \leq y \leq 0.07) (8 расм) ва *n*-GaAs-*p*-(InSb)_{1-v}(Sn_2)_v (0 \leq y \leq 0.05) (10 расм) гетероструктураларининг спектрал фотосезгирлиги ўрганилди. ККлар таркибида GaAs нинг моляр хиссаси 0.5 % атрофида. (GaSb)_{1-v}(Si₂)_v ва (InSb)_{1-v}(Sn₂)_v ҚҚлардаги GaAs молекулаларининг ионлашиш энергияси (*E_{i,GaAs}*), текширилган структураларнинг спектрал фотосезгирлигининг қисқа тўлкин сохасида ётувчи ва Ga-As ковалент боғлари иштирокида хосил бўлувчи электрон-ковак жуфтликлари билан боғлиқ бўлган сезгирлик чўққисининг узун тўлқинлар соҳаси орқали баҳоланди. (GaSb)_{1-v}(Si₂)_v ҚҚда $E_{i,GaAs} = 1.2$ эВ бўлди. $E_{i,GaAs}$ ни $E_{g,GaAs}$ га нисбатан ўзгариши ҚҚнинг тетраэдрик панжарасида GaAs и GaSb молекулалари атомлари электрон қобиқларининг гибридизацияси билан, жумладан, ковалент радиусларининг фарқи $R_{\text{GaAs}} = r_{\text{Ga}} + r_{\text{As}} = 2.45$ Å ва $R_{\text{GaSb}} = r_{\text{Ga}} + r_{\text{Sb}} = 2.64$ Å $(R_{\text{GaAs}} < R_{\text{GaSb}})$ билан боғлиқ бўлиши мумкин. ҚҚда GaAs молекуласи GaSb молекуласи билан алмашганда, GaAs молекуласи кристалл панжарага мослашади ва Ga-As ковалент боғининг узунлиги ортади, натижада у 2.45 Å дан катта бўлади. Бу эса ўз навбатида Ga-As ковалент боғининг узилиш энергиясини, соф яримўтказгич GaAs учун хос бўлган 1.43 эВ қийматидан (GaSb)_{1-у-} $_z(Si_2)_y(GaAs)_z \ (0 \le y \le 0.07, \ 0 \le z \le 0.005)$ ҚҚдаги 1.2 эВ гача камайишига олиб келади. (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y<GaAs> ($0 \le y \le 0.05$) ҚҚда $E_{i,GaAs} = 1.0$ эВ. $E_{i,GaAs}$ қийматиниг ўзгариши худди $(GaSb)_{1-v-z}(Si_2)_v(GaAs)_z$ $(0 \le y \le 0.07, 0 \le z \le 0.07)_v$ 0.005) ҚҚдаги каби ковалент радиуслар фарқи $R_{\text{GaAs}} = 2.45$ Å ва $R_{\text{InSb}} = 2.87$ Å $(R_{\text{GaAs}} < R_{\text{InSb}})$ билан боғлиқ. $R_{\text{InSb}} = 2.87$ Å $> R_{\text{GaSb}} = 2.64$ Å бўлганлиги сабабли, Ga-As ковалент боғининг узунлиги (InSb)_{1-v-z}(Sn₂)_v(GaAs)_z ҚҚда (GaSb)_{1-v-z}(Si₂)_v(GaAs)_z ҚҚдагига нисбатан ҳам каттароқ бўлади ва натижада GaAs молекулалари атомларининг ўзаро таъсир кучи янада камаяди, бу эса Ga-As ковалент боғининг узилиш энергиясини янада камайишига олиб келади. Шундай қилиб, Е_{і.GaAs} нинг қиймати асос модданинг таркибига боғлиқ. 11- ва 12-расмларда Е_{і.GaAs} энергиянинг асос модданинг таъқиқланган зона кенглиги (Е,) ва панжара доимийси (а)га боғлиқлиги курсатилган. 11расмдан кўриниб турибдики, Eg камайиши билан Ei.GaAs нинг камайиши кузатилади. 11-расмнинг тахлили шуни кўрсатадики, E_{i.GaAs} қийматини E_g га

боғлиқлиги чизиқли бўлиб, унинг тўғри чизиқ бўйича аппроксимацияси куйидаги эмпирик функционал боғлиқликни беради:

$$E_{i,\text{GaAs}}(\Im B) = 0.98\,(\Im B) + 0.31 \times E_g\,(\Im B).$$
(1)

ни турли яримўтказгичларда ўзгариши, эхтимол, атрофдаги Ei GaAs кристалл панжара атомлари таъсирида GaAs молекулаларини деформацияланиши билан боғликдир. Кристалл панжара эластик зўрикишининг потенциал энергиясини минималлаштириш учун киритма молекулалари панжарага мослашади ва натижада Ga ва As атомлари орасидаги масофа ўзгаради. Демак, GaAs молекулалари атомларининг ўзаро таъсир кучи ва энергияси ўзгаради ва натижада Ga-As ковалент боғининг узилиш энергияси ўзгаради. Буни 12-расмда кўрсатилганидек, яримўтказгич моддалари панжара доимийсини ортиши билан *Е*_{*i*,GaAs} нинг камайиши тасдиклайди. 12-расмда келтирилган тажрибавий нукталар битта тўғри чизикда ётади. Ушбу нукталарнинг аппроксимацияси E_{i,GaAs} нинг панжара доимийсига боғлиқлигини қуйидаги эмпирик кўринишини беради:

$$E_{i, \text{ GaAs}}(\Im B) = 4.27 (\Im B) - 0.50 (\Im B/Å) \times a(Å).$$
 (2)





11-расм. GaAs киритма молекулаларининг ионлашиш энергиясини яримўтказгичларнинг таъқиқланган зона кенглиги (*E*_g)га боғлиқлиги



Элементар яримўтказгичлар ва $A^{IV}B^{IV}$, $A^{II}B^{V}$, $A^{II}B^{VI}$ яримўтказгичли бирикмалардаги кристал панжаралар турларининг фарқини, ковалент ва ион боғлари хиссаларининг фарқини ва ион қолдиқларининг валент электронлар билан ўзаро таъсир кучларини хисобга олган холда тахмин қилиш мумкинки, (1) ва (2) боғлиқликлар, фақатгина GaAs молекалалари Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb лар асосидаги ҚҚларда бўлганида ўринли бўлади.

Диссертациянинг «Монокристалл Si тагликларга олинган (Si₂)₁. _y(CdS)_y ва Si_{1-y-z}C_ySn_z қаттиқ қоришмалари асосидаги структураларнинг электрофизик ва фотоэлектрик хоссалари» деб номланган тўртинчи бобида (Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$), (Si₂)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn₂)_z ҚҚлар ва улар асосидаги *p-n*-структураларнинг электрофизик хусусиятлари ўрганилган. (Si₂)_{1-y}(CdS)_y ҚҚлари суюқ фазали эпитаксия усули билан Sn-Si-CdS қоришма-эритмадан, кристалланишнинг бошланиш харорати 1150 °C да, 1 град/мин совитиш тезлигида ва қоришма-эритма қалинлиги 1 мм бўлганда Si (111) тагликларига ўстирилган. Эпитаксиал қатламлар электрон турдаги ўтказувчанликка, 16 мОм см солиштирма қаршиликка ва 300 К ҳароратда ток ташувчилар ~ 300 см²/В с ҳаракатчанликга ва 25 мкм қалинликка эга бўлди.

Рентген диффракцияси усули билан кристалл тузилишини ўрганиш шуни кўрсатдики, $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ ($0 \le y \le 0.01$) ҚҚлари (111) йўналишли монокристалл тузилишга эга. Юпқа қатламда (111) йўналишли, субкристаллитларининг ўлчами 62 нм бўлган CdS нанокристаллар фазаси мавжуд. Юпқа қатламда кремний ($r_{Si}^{4+} = 0.42$ Å), кадмий ($r_{Cd}^{2+} = 0.97$ Å) ва олтингугурт ($r_s^{2-} = 1.81$ Å) ион радиусларининг фарқи туфайли юзага келган, ўсиш жараёни билан боғлиқ бўлган, нотекис тақсимланган эластик зўриқишлар мавжуд.

p-Si-n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y (0 $\leq y \leq 0.01$) структуралари волтампер характеристикасининг экспоненциал соҳаси таҳлили натижасида структуранинг n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y базасида асосий бўлмаган ток ташувчилар — ковакларнинг диффузия узунлиги 13.2 мкм ва яшаш вақти 4.5·10⁻⁷ с аниқланди. Si таглик ва эпитаксиал қатлам орасида (Si₂)_{1-y}(CdS)_y ҚҚсидан иборат юқори қаршиликка эга, хона ҳароратида солиштирма қаршилиги 6.7·10⁷ Ом·см ва эркин ток ташувчиларнинг концентрацияси ~ 3.1·10⁸ см⁻³ бўлган ўтиш қатлами мавжудлиги кўрсатилди.



1 - p-Si-n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$). 2 - p-Si-n-Si.

13-расм. Структураларнинг спектрал фотосезгирлиги



14-расм. $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y \ (0 \le y \le 0.01)$ ҚҚнинг энергетик зоналар диаграммаси

13-расмда текширилган *p*-Si–*n*-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) ва назорат *p*-Si–*n*-Si структуралари фотосезгирлигини фотонлар энергиясига боғлиқлиги кўрсатилган. 13-расмдан кўриниб турибдики, текширилган структуранинг сезгирлиги фотонларнинг $E_{ph} = 1.14$ эВ энергиясидан бошланган ва кремний *p*-Si–*n*-Si структураларига нисбатан қисқа тўлқин томонга қараб 0.1 эВ га сурилган. (Si₂)_{1-y}(CdS)_y ҚҚсининг тетраэдрик панжарасида жойлашган CdS молекулаларининг ковалент боғларини узилиши билан боғлиқ бўлган фотонларнинг $E_{ph} \ge 2.2$ эВ энергияларида сезгирликнинг ошиши кузатилади.

 $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ (0 $\leq y \leq 0.01$) ҚҚда CdS молекулалари валент зонада ҚҚнинг ўтказувчанлик зонаси тубидан 2.2 эВ пастда жойлашган локал энергетик сатҳ ҳосил қилади (14-расм), провардида киритмали фотоволтаик эффекти юзага келади ва нурланиш спектрининг юқори энергияли фотонлар соҳасида структуранинг фотосезгирлиги ошади. $Si_{1-y-z}C_ySn_z$ ҚҚлари КРЗ маркали техник кремний билан тўйинтирилган Sn ли қоришма-эритмадан кристалланишнинг бошланиш ҳарорати 1050°С, қоришма-эритма калинлиги 1 мм ва совитиш тезлиги 1 градус/минут бўлган шароитда суюқ фазадан Si (111) тагликларига ўстирилган. Эпитаксиал қатламлар ~ 35 мкм қалинликка, электрон турдаги ўтказувчанликка ва ~ 500 мОм см солиштирма қаршиликка эга бўлди.

15-расмда рентген микрозонд тахлили асосида олинган КК таркибий кисмлари атомларининг таксимланиш профили курсатилган. 15-расмдан кўриниб турибдики, КК катламида С ва Sn атомлари мавжуд. Таглик-юпка катлам ўтиш сохасида ~ 5-7 мкм калинликгача С атомлариниг хиссаси ~ 4.5 мол.% гача ошиб боради ва сўнгра 25 мкм калинликгача аста-секин ~ 3 мол.% гача камаяди. Sn хиссаси катламда 0.6–0.86 мол.% ораликда ўзгаради. Si₂ ва SiSn молекулалари атомларининг ковалент радиуслари йигиндисининг фарки 9.8% га тенг. Лекин Si₂ и SiC молекулалари атомларининг ковалент радиуслари йиғиндисининг фарки 17% ни ташкил қилади ва бу ўрин алмашувчи ҚҚни ҳосил қилиш шарти чегарасидан анча катта. Тахминимизча, КРЗ маркали техник кремнийда, сфалерит турдаги кубик модификацияли (β-SiC) кремний карбидининг киритмалари мавжуд. ҚҚнинг ўсиш жараёнида хароратнинг пасайиши билан коришма-эритма нафакат Si, балки SiC билан хам тўйинади. Натижада SiC молекулалари эпитаксиал қатламга кириб субкристаллитлар хосил қилади. Кремнийнинг кристалл панжараси кубик олмоссимон бўлгани учун кремний панжарасига кубик модификациядаги (β-SiC) кремний карбидини кириш эхтимоллиги бошка модификацияларнинг (4H SiC, 6H SiC) кириш эҳтимоллигидан анча юқори. Наноўлчамли β-SiC субкристаллитларнинг когерент жойлашуви Si кристалл панжарасини кучли деформацияламайди ва эпитаксиал катламда, тажрибада кузатилганидек, углерод атомларининг катта концентрациясини юзага келтиради. Si₂ ($r_{\rm Si} + r_{\rm Si}$ = 2.34 Å) ва SnC ($r_{Sn} + r_{C} = 2.17$ Å) молекулалари атомларининг ковалент фарки ~ 7.2% радиуслари йиғиндиларининг га тенг. Демак. SiC панжараостидаги Si атом тугунларини Sn атомлари билан алмаштириш, Si₂ панжараостидаги атом тугунларини алмаштиришга қараганда энергетик жихатдан анча қулай. Si атомларини Sn атомлари билан бундай алмашинуви эпитаксиал қатламда, тажрибада кузатилганидек, Sn атомларини бироз миқдорда хосил бўлишига сабаб бўлади.

 $p-\text{Si}-n-(\text{Si}_2)_{1-y-z}(\text{SiC})_y(\text{Sn}_2)_z$ ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) ва p-Si-n-Si структураларнинг фотосезгирлигини спектр бўйича ўзгаришининг тадқиқоти хар икки структура учун фотосезгирликнинг узун тўлқинли соҳаси айнан бир хил эканлигини кўрсатди (16-расм). Si ли структуралардан фарқли равишда $p-\text{Si}-n-(\text{Si}_2)_{1-y-z}(\text{SiC})_y(\text{Sn}_2)_z$ структураларда Si-C ковалент боғларининг узилиши билан боғлиқ бўлган фотонлар энергияси $E_{\text{ph}} \ge 2$ эВ бўлганда фотосезгирликнинг ошиши кузатилади. SiC молекулалари (Si₂)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn₂)_z ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) ҚҚнинг ўтказувчанлик зонаси тубидан 2 эВ пастда, валент зонада жойлашган энергетик сатҳ ҳосил қилади. Si-C ковалент боғининг боғининг β -SiC яримўтказгичли бирикмада узилиш энергияси 2.36 эВ ни

ташкил этса, $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) ҚҚда, кремний атомлари таъсири натижасида, 2 эВ гача камаяди.







1 – *p*-Si–*n*-(Si₂)_{1-*y*-*z*}(SiC)_{*y*}(Sn₂)_{*z*} (0≤*y*≤0.045; 0≤*z*≤0.008) 2 – *p*-Si–*n*-Si.

16-расм. Структураларнинг спектрал фотосезгирлиги

Шундай қилиб, кремний асосидаги ҚҚлардаги CdS ва SiC молекулалари валент зона ичида жойлашган энергетик сатҳлар ҳосил қилади ва булар нурланиш спектрининг юқори энергияли фотонлар соҳасида структуралар сезгирлигининг ошишига олиб келадик ҳамда бу ҳолат самарали қуёш элементлари ишлаб чиқишда муҳим аҳамият касб этади.

Диссертациянинг «GaAs тагликларда олинган (GaAs)_{1-у}(ZnSe)_у каттик қоришмаларининг эпитаксиал қатламлари; уларнинг структуравий, электрофизик ва люминесцент хоссалари» деб номланган бешинчи бобида (GaAs)_{1-у}(ZnSe)_у ҚҚнинг структуравий, электрофизик ва люминесцент хоссалари тадқиқ қилинган. ҚҚлар суюқ фазадан Sn–GaAs– ZnSe қоришма-эритмадан GaAs (100) тагликларга кристалланишнинг бошланиш температураси 710°С, қоришма-эритма қалинлиги 1 мм ва совутиш тез-



1 – GaAs, 2 – ZnSe 17-расм. (GaAs)_{1-у}(ZnSe)_у ҚҚ қатламида молекулалар тақсимоти профили

лиги 1 градус/минут шароитида ўстирилган. Қатламлар ковак ўтказувчанликка эга бўлиб, эркин ток ташувчилар концентрацияси (3-5)·10¹⁸ см⁻³ га тенг. Технологик ўстириш жараёни параметрларига боғлиқ холда ўстирилган қатламлар қалинлиги 10 мкм гача бўлади. Рентген микрозонд тахлили натижаларига асосланиб, қатлам қалинлиги бўйича ҚҚ таркибий қисмлари молекулаларининг моляр микдорлари таксимоти аникланди (17-17-расмдан кўриниб турибдики, расм). қатлам қалинлиги 0.6 мкм гача ортиши билан ККдаги ZnSe микдори дастлаб тез ўсади ва ўзининг максимал киймати 80 мол.% га эри-

шади. Буни кристалланиш чегарасида қоришма-эритмани рух селениди билан тўйинганлиги орқали изоҳлаш мумкин. Бу қатламда ZnSe концентрациясининг ўзгариши ~ 13 мол.% ZnSe/0.1 мкм ни ташкил этади. Кейин ZnSe миқдори 1.8 мкм қалинликгача 5.8 мол.% ZnSe/0.1 мкм

градиенти билан тез камайиб боради, ундан кейин эса секинрок – 0.25 мол.% ZnSe/0.1 мкм ва нихоят қатламнинг юзага яқин сохасида 4 мол.% қийматга эришади. Катлам юзасидан 2 мкм гача чукурликда ZnSe нинг моляр микдори 10 мол.%. дан ошмайди.

Рентген дифрактограммасининг тадкикоти катламлар (100) йўналишида ўсган монокристалл эканлигини кўрсатди. Катламнинг панжара доимийси $a_f = 5.6544$ Å, тагликники эса $a_s = 5.6465$ Å эканлиги аниқланди.

ZnSe молекулаларини (GaAs)_{1-v}(ZnSe)_v ҚҚнинг фотоэлектрик хусусиятларига таъсирини аниклаш учун эпитаксиал катлам юзасининг ФЛ спектри тадқиқ қилинди (18-расм). ФЛ 5 К ҳароратда тўлқин узунлиги 325 нм бўлган лазер нури ёрдамида уйғотилди. ФЛ спектри 0.40 дан 0.76 мкм гача оралиқни қамраб олади ва $\lambda_{\text{max}} = 465$ нм (2.67 эВ) да тор чўққига эга. GaAs ва ZnSe бирикмаларни 5 К хароратдаг
и $E_{\rm g}$ си мос равишда 1.51 ва 2.81
 эВ ни ташкил қилишидан келиб чиқиб, λ_{max} даги чўққини ZnSe хосил қилган энергетик сатхларга (*E_{i,ZnSe}* = 2.67 эВ) электронларни ўтиши натижасида фотонларни нурланиши билан боғлаш мумкин. Кенг нурланиш спектрида нурланиш чўққисининг аниқ ажралиб туриши (GaAs)_{1-v}(ZnSe)_v ($0 \le y \le 0.05$) ҚҚсининг валент зонасида жойлашган ёйилган энергетик сатҳнинг ($\Delta E_{i,ZnSe}$) пайдо бўлишидан далолат беради (19-расм). Энергияси 3.82 эВ бўлган лазер нури эпитаксиал қатламнинг ~ 1 мкм қалинликдаги юза қисмида тўлиқ ютилади, бинобарин, люминесцент нурланиш қатламнинг ZnSe нинг моляр миқдори ~ 4÷5 % бўлган тагқатламидан чиқади. Энергетик сатҳларнинг ёйилган тасмаси галлий арсенидининг тетраэдик панжара матрицасида жойлашган Zn-Se боғлари билан боғлиқдир. Люминесцент нурланиш чўққисининг ярим кенглиги орқали бахоланган ёйилган энергетик сатхлар тасмасининг кенглиги 0.09 эВ ни ташкил этади.



фотолюминесценция спектри



ZnSe бирикмасининг тетраэдик панжарасида жойлашган Zn-Se ковалент боғининг узилиш энергияси материалнинг таъқиқланган зонаси кенглиги билан аникланади ва 5 К хароратда 2.81 эВ ни ташкил этади. Бирок ФЛ натижаларининг кўрсатишича, ZnSe молекулалари GaAs нинг кристал панжарасида жойлашганда уларни ўраб турган асос яримўтказгич атомлари таъсирида Zn-Se боғининг узилиш энергияси 2.67 эВ гача камаяди. GaAs материалида Zn-Se боғининг узунлиги (R_{Zn-Se}) уни ўраб олган атомларга боғлиқ эканлиги псевдопотенциал ясси тўлқинлар хисоби асосида назарий жиҳатдан кўрсатилган³. Соф ZnSe бирикмасида R_{Zn-Se} = 2.42 Å эканлиги хисобга олинган холда, GaAs нинг тетраэдрик панжарасида Zn киритма атоми атрофида 4 та Se атоми бўлганда, яъни Zn-Se₄ кластерида унинг қиймати $R_{\text{Zn-Se}} = 2.44$ Å, Zn-Se₃As кластерида – $R_{\text{Zn-Se}} = 2.46$ Å, Zn-Se₂As₂ кластерида – $R_{\text{Zn-Se}} = 2.49$ Å, Zn-SeAs₃ кластерида – $R_{\text{Zn-Se}} = 2.51$ Å га тенг бўлади. Шунга ўхшаш, GaAs да киритма атоми Se атрофида 4 та Zn атоми бўлганда, яъни Se-Zn₄ кластерида R_{Zn-Se} киймати $R_{Zn-Se} = 2.42$ Å, Se-Zn₃Ga кластерида – $R_{\text{Zn-Se}} = 2.45$ Å, Se-Zn₂Ga₂ кластерида – $R_{\text{Zn-Se}} = 2.48$ Å, Se-ZnGa₃ кластерида – $R_{\text{Zn-Se}} = 2.51$ Å га тенг бўлади. Кўриниб турибдики, Zn-Se боғ узунлиги, хам катион, хам анион тугунлари учун, унинг атрофида қанча кўп GaAs атомлари бўлса, у шунча катта бўлади. GaAs даги Zn-Se ковалент боғининг узилиш энергияси $E_{i, ZnSe}$ нинг камайиши боғ узунлигининг ортишига боғлиқ бўлса керак. R_{Zn-Se} ортиши билан Zn ва Se атомларининг таъсирлашуви заифлашади ва бу E_{i.ZnSe} нинг камайишига олиб келади. (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} ҚҚ даги ZnSe молекулаларининг ионланиш энергияси ҚҚ таъқиқланган зонаси кенглигидан катта, бундан ZnSe молекулаларининг энергетик сатхи ҚҚнинг валент зонасида жойлашиши келиб чиқади (19расм).

(GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y ҚҚсида ZnSe концентрацияси кам бўлганда ҚҚ тақиқланган зонаси кенглиги ($E_{g,GaAsZnSe}$)нинг ўзгариши аҳамиятли эмас. $0 \le y \le 0.1$ ораликда $E_{g,GaAsZnSe}$ нинг ўзгариши 0.25% дан ошмайди, яъни деярли ўзгармайди. Бу Zn+Se нинг GaAs да кластерланиш имкони камлиги билан изоҳланади. Буни ҳисобга олган ҳолда ZnSe молекулаларининг энергетик сатҳларини (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} ҚҚсининг валент зонасида жойлашиш ўрнини баҳолаш мумкин: $\Delta E_{i,ZnSe} = E_{ph} - E_{g,GaAsZnSe} = 2.67 - 1.51 = 1.16$ эВ, яъни $E_{i,ZnSe}$ сатҳи ҚҚ валент зонасининг тепа қисмидан 1.16 эВ пастда жойлашади.

Киритма ҳамда икки ва кўп таркибли ҚҚ молекулалари атомларининг ўзаро таъсирини ўрганиш мақсадида E_g ва статик диэлектрик сингдирувчанлик (СДС)ни элементар яримўтказгичлар ва $A^{III}B^V$ бирикмалари молекулалари атомларининг ковалент радиуслари йиғиндиси ва электрманфийлиги каби материалнинг бирламчи фундаментал параметрларига боғлиқлиги ўрганилди. ҚҚдаги атомнинг муҳим энергетик параметрларидан бири В.К. Семенченко томонидан киритилган умумлашган момент (УМ) бўлиб, у заряди *q*, валентлиги *z*, радиуси *r* бўлган ионнинг куч майдонини тавсифлайди:

$$m = \frac{q \cdot z}{r} \quad . \tag{3}$$

³ L.G. Wang and Alex Zunger Dilute. Nonisovalent (II-VI)-(III-V) Semiconductor Alloys: Monodoping, Codoping, and Cluster Doping in ZnSe-GaAs // Physical Review B. 2003. Vol. 68, 125211 pp.1-8.

УМ бирламчи катталик сифатида кристаллнинг молекуляр майдонига ионнинг реакциясини кўрсатади. А.С. Саидов атомнинг электрон қобиқ структураси ва ядронинг эффектив зарядини хисобга олган холда УМ учун куйидаги кўринишдаги ифодани таклиф этди:

$$m^* = \frac{(A - \gamma) \cdot e}{r_u} - \frac{1}{2} \cdot a_o q \, \frac{n^* (n^* - 1)}{r_u^2} \,, \tag{4}$$

бу ерда A – элементнинг химиявий элементлар даврий системасидаги тартиб рақами, γ – экранлаштириш коэффициенти, r_u – ионнинг кристаллографик радиуси, a_o – бор радиуси, n^* – эффектив бош квант сони. АВ бирикмалар молекулаларининг УМ А ва В таркибий қисмларнинг УМ ни энг юқори валентлигига мос келувчи ўрта арифметик қийматлари билан баҳоланади:

$$m_{AB}^* = \frac{m_A^* + m_B^*}{2} \quad . \tag{5}$$

(4) ва (5) ифодаларда АВ молекула атомларининг электрманфийлиги $(\Delta \chi = |\chi_A - \chi_B|)$ хисобга олинмаган. Бироқ AB молекула учун $\Delta \chi$ нинг қийматини ортиши билан химиявий боғнинг ион ташкил этувчисининг хиссаси ортади ва бу боғланиш энергиясининг ортишига олиб келади. Бинобарин, $\Delta \gamma$ нинг ўзгариши билан яримўтказгичнинг энергетик параметрлари, хусусан, Eg ўзгариши лозим. 20-расмда таъқиқланган зона кенглиги E_{g} ни $\Delta \chi = |\chi_{A^{III}} - \chi_{B^{V}}|$ бўйича ўзгариши кўрсатилган. 20-расмдан кўриниб турибдики, Дхнинг ортиши билан Eg нинг ортишида умумий тенденция борлиги кузатилади. Лекин баъзи яримўтказгичлар учун $\Delta \chi$ нинг якин кийматларида $E_{\rm g}$ нинг қийматлари анчагина фарқ қилишини кўрамиз, масалан, InAs ($\Delta \chi_{InAs} = 0.40$, $E_{\rm g}=0.35$ эВ) ва InP ($\Delta\chi_{\rm InP}=0.41,~E_{\rm g}=1.34$ эВ), шунингдек GaAs ($\Delta\chi_{\rm GaAs}=$ 0.37, $E_{\rm g} = 1.43$ эВ) ва GaP ($\Delta \chi_{\rm GaP} = 0.38, E_{\rm g} = 2.27$ эВ). Бу холат молекулалар атомлари ковалент радиуслари йиғиндисидаги фарқ туфайли юзага келаётган бўлиши мумкин $R = r_{A^{III}} + r_{B^{V}}$: $R_{InAs} = 2.687$ Å, $R_{InP} = 2.597$ Å, шунингдек R_{GaAs} = 2.45 Å, $R_{\rm GaP}$ = 2.36 Å, яъни $\Delta \chi$ нинг жуда яқин қийматларида $R = r_{A^{III}} + r_{B^V}$ нинг камайиши билан $E_{\rm g}$ нинг ортиши кузатилади. Атомлар орасидаги масофа қанча кичик бўлса, химиявий боғ шунча кучли бўлади. Бу фикрни 21расмда келтирилган $E_{\rm g}$ ни $R = r_A + r_B$ га боғлиқлиги тасдиқлайди. 21-расмда нуқталарнинг тарқоқлиги, юқорида кўрсатиб ўтилганидек, xap хил молекулалар учун Δχ ни ҳар хил қийматга эга бўлишидир.

 $\Delta \chi$ ва *R* ни яримўтказгичнинг E_{g} сига биргаликдаги таъсир конунияти таҳлилини, E_{g} ни ҳисобга олган ҳолда, $\Delta \chi$ ни *R* га 22-расмда келтирилган боғлиқлиги ёрдамида бажариш мумкин. 22-расмдан кўриниб турибдики, E_{g} нинг қийматлари $r_{A^{III}} + r_{B^{V}}$ нинг ўзгармас қийматларида $\Delta \chi$ нинг ортиши билан (22-расм, стрелка юкорига) ва $\Delta \chi$ нинг ўзгармас қийматларида $r_{A^{III}} + r_{B^{V}}$





20-расм. А^ШВ^V бирикмалар таъқиқланган зонаси кенглигини А^ШВ^V молекулалари атомларининг Δχ сига боғлиқлиги



Бу далилларга таянган холда молекулаларнинг УМини бахолашда электрманфийликлар фарки $\Delta \chi = |\chi_{A^{IV}} - \chi_{B^{IV}}|$ ва $\Delta \chi = |\chi_{A^{III}} - \chi_{B^{V}}|$ куйидаги кўринишда хисобга олинди:

$$m_{AB}^{**} = \frac{((A - \gamma)_A + (A - \gamma)_B - 0.35) \cdot q \cdot (1 + \Delta \chi)}{r_A + r_B}.$$
 (6)

Фикримизча, m_{AB}^{**} радиуси $R = r_A + r_B$ ва эффектив заряди $((A - \gamma)_A + (A - \gamma)_B - 0.35) \cdot q$ бўлган икки атомли молекула сфераси сиртидаги потенциални ифодалайди ва химиявий боғнинг ионли қисмини ҳам ҳисобга





Молекула атомлари олади. $R = r_A + r_B$ ва эффектив зарядининг доимий қийматида $\Delta \chi$ қанчалик кўп фарқ қилса, унинг энергетик характеристикалари шунчалик кучли бўлади. (6)ифодадан гетерополяр боғ потенциали гомополяр боғ потенциалидан кучлирок экани келиб чикади. Шу сабабли $m_{_{4B}}^{^{**}}$ катталик молекулаларнинг индивидуал хусусиятларини *m* ва m_{AB}^* га нисбатан аникрок ифодалашини кутиш мумкин ва у кўп таркибли системаларда молекула-

ларнинг ўзаро таъсирлашувида намоён бўлади. 21- ва 22- расмлардан кўриниб турибдики, $R = r_{III} + r_V$ нинг ортиши билан E_g камаяди, яъни атомлар ковалент боғининг узилиш энергияси камаяди, бу холат назаримизда,

атомлар ўзаро таъсирлашув потенциал энергиясининг улар орасидаги масофа ортиши билан камайишига боғлиқ. Бу хулоса Si-Si ни GaAs да, Ga-As ни $(GaSb)_{1-y}(Si_2)_y$ ва $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$ да, Cd-S ва Si-C ларни Si да, Zn-Se ни GaAs даги ковалент боғларининг узилиш энергиясининг ўзгариши бўйича олинган тажриба натижаларини тасдиқлайди.

Шундай қилиб, геометрик факторлар, эффектив зарядлар, электрон қобиқ типлари билан биргаликда атомларнинг электрманфийлигини ҳисобга олиш, ҳимиявий элементлар атомларининг бирламчи фундаментал параметрлари асосида, яримўтказгичларнинг электрофизик, ҳусусан, энергетик ҳусусиятларини янада тўғрироқ тавсифлаш имконини беради, бу ўз навбатида қоришмаларнинг молекуляр-статистик назарияси ривожига ўз ҳиссасини қўшади.

ХУЛОСА

Si, Ge, Sn, GaAs, GaSb, InSb, ZnSe, CdS, SiC асосидаги қаттиқ қоришмалар ва улар асосидаги *p*–*n*-ўтишларнинг фотовольтаик, фотоиссиқликвольтаик ва люминесцент хоссаларига Si₂, GaAs, ZnSe, CdS, SiC молекулаларининг таъсирини ўрганиш бўйича олиб борилган тадқиқотлар натижасида қуйидаги хулосаларга келинди:

1. Кенг зонали яримўтказгичларнинг молекулалари тор зонали яримўтказгичларда киритма молекула сифатида валент зонада жойлашган локаллашган энергетик сатҳларни, тор зонали яримўтказгичларнинг молекулалари эса кенг зонали яримўтказгичларда таъқиқланган зонада жойлашган энергетик сатҳларни ҳосил қилиши исботланди.

2. Кенг зонали яримўтказгичлар молекулалари атомларининг ковалент боғи узилиш энергияси улар тор зонали яримўтказгичларнинг кристал панжарасида бўлганида одатдаги кенг зонали яримўтказгич кристалл панжарасидаги кийматига нисбатан камайиши, тор зонали яримўтказгичлар молекулалари атомлари ковалент боғининг узилиш энергияси эса улар кенг зонали яримўтказгич кристалл панжарасида бўлганида одатдаги тор зонали яримўтказгич кристалл панжарасидаги кийматига нисбатан ортиши илк бор аниқланди.

3. GaAs киритма молекулалари нурланиш спектрининг қисқа тўлқинлар соҳасида ($hv \ge 1.0$ эВ) Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb асосида олинган қаттиқ қоришмалар асосидаги *p*-*n*-структураларнинг фотосезгирлигини оширишга олиб келиши, GaAs молекулалари (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> ва (InSb)₁₋ _y(Sn₂)_y<GaAs> қаттиқ қоришмаларида валент зонада локаллашган энергетик сатҳларни ҳосил қилиши, ҳамда қаттиқ қоришма таъқиқланган зонаси кенглигининг ортиши билан Ga-As ковалент боғининг узилиш энергиясини ортиши ва кристал панжара доимийсининг ортиши билан эса - камайиши кўрсатилди.

4. GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> қаттиқ қоришма фотолюминесценциясининг спектрида 77 К хароратда 1.33 эВ энергияли фотонларда чўққининг мавжудлиги ва у Si₂ киритма молекулаларини қаттиқ қоришманинг

таъқиқланган зонасида жойлашган энергетик сатҳи туфайли пайдо бўлганлиги аниқланди.

5. Температуранинг ортиши билан киритмали ютиш соҳасида 1.31 эВ энергияли фотонларда *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂>–*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структура фототокининг ортиши ва бу киритма Si₂ молекулаларининг таъқиқланган зонада жойлашган энергетик сатҳлари иштирокида фотонлар ва иссиқликнинг биргаликдаги таъсири остида электронлар ва ковакларнинг генерацияси туфайли юз бериши исботланди.

6. СdS молекулалари нурланиш спектрини қисқа тўлқинлар соҳасидаги $hv \ge 2.2$ эВ энергияли фотонларда p-Si-n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y (0 $\le y \le 0.01$) структураларнинг фотосезгирлигини ортишига олиб келиши ва бу CdS молекулаларини (Si₂)_{1-y}(CdS)_y (0 $\le y \le 0.01$) қаттиқ қоришманинг валент зонасида локаллашган энергетик сатҳлари ҳисобига рўй бериши, ҳамда (Si₂)_{1-y}(CdS)_y (CdS)_y қаттиқ қоришма кристал панжарасида жойлашган СdS молекулалари атомлари ковалент боғининг узилиш энергияси уларни одатдаги CdS бирикма кристал панжарасидаги кийматига нисбатан камайиши кўрсатилди.

7. (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} қаттиқ қоришма фотолюминесценциясининг спектрида 5 К ҳароратда 2.67 эВ энергияли фотонларда тор чўққининг мавжудлиги ва бу энергетик сатҳи валент зонада локаллашган ZnSe молекулалари ҳисобига рўй бериши, ҳамда қаттиқ қоришма кристал панжарасида жойлашган ZnSe молекулалари атомлари ковалент боғининг узилиш энергияси уларни одатдаги ZnSe бирикма кристал панжарасидаги қийматига нисбатан камайиши илк бор аниқланди.

8. А^ШВ^V бирикмаларида атомларнинг ковалент радиус ўлчами, электрон кобик структураси ва ядросининг эффектив заряди билан бир каторда атомларнинг электрманфийлигини хисобга олиш бу материаллар учун тажрибада аникланган таъкикланган зона кенглигини молекулаларнинг умумлашган моментлари бўйича ўзгаришини тушинтириш имконини бериши кўрсатилди ва молекулаларнинг умумлашган моменти учун атомларнинг электрманфийлигини хисобга олувчи ифода таклиф этилди.

9. Si ҳамда CdS ва SiC асосида олинган қаттиқ қоришмалар одатдаги кремнийга нисбатан баъзи имкониятларга эга бўлган: қисқа тўлқинлар соҳасида кенгайган фотосезгирликка эга; юқори ҳароратларда самарадор ишлай оладиган қуёш элементларини ишлаб чиқишда қўлланилиши тавсия этилди.

10. Si тагликларига GaSb эпитаксиал қатламларини ўстириш учун буфер қатлам вазифасини ўтовчи (Si₂)_{1-у-z}(GaSb)_x(GaAs)_z қаттиқ қоришмаси GaSb га нисбатан юқори фотосезгирликка эга эканлиги ва улар самарадор фотоэлементларни ишлаб чиқиш учун истиқболли материал сифатида қўлланиши тавсия этилди.

НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.30.05.2018.FM/Т.34.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

УСМОНОВ ШУКРУЛЛО НЕГМАТОВИЧ

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРИМЕСЕЙ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ, АРСЕНИДА-ГАЛЛИЯ, СЕЛЕНИДА-ЦИНКА, СЕРНИСТОГО-КАДМИЯ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУР, ПОЛУЧЕННЫХ НА ИХ ОСНОВЕ

01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА (DSc) ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

Тема диссертации доктора наук (DSc) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2017.1.DSc/FM44.

Диссертация выполнена в Физико-техническом институте.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекском, русском, английском (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.fti.uz) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziyonet.uz).

Научный консультант:	Саидов Амин Сафарбаевич доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты:	Андреев Вячеслав Михайлович доктор технических наук, профессор, член-корр. Российской Академии наук
	Гулямов Гафур доктор физико-математических наук, профессор
	Арипов Хайрулло Кабулович доктор физико-математических наук, профессор
Ведущая организация:	Национальный университет Узбекистана

Защита диссертации состоится «___» ___ 2018 года в ____ часов на заседании Научного совета DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 при Физико-техническом институте. Адрес: 100084, г.Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, дом 2Б. Административное здание Физико-технического института, зал конференций. Тел./Факс: (+99871) 235-42-91; e-mail: ftikans@uzsci.net.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Физикотехнического института (зарегистрирована за № 233). Адрес: 100084, г.Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, дом 2Б. Тел./Факс: (+99871) 235-30-41.

Автореферат диссертации разослан «___» ____ 2018 г.

(реестр протокола рассылки № _____ от «____» ____ 2018 г.)

Н.Р. Авезова

председатель Научного совета по присуждению ученых степеней, д.т.н.

О.А. Абдулхаев

ученый секретарь Научного совета по присуждению ученых степеней, доктор философии по ф.-м.н.

А. Абдурахманов

председатель научного семинара при Научном совете по присуждению ученых степеней, д.т.н., профессор

Введение (аннотация докторской (DSc) диссертации)

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее актуальных направлений развития время в мировой практике одним из физики полупроводников является поиск путей интеграции кремниевой (Si) технологии с технологией бинарных соединений А^ШВ^V и А^{II}В^{VI} с целью удешевления их производства. В этом направлении наиболее важным является получение твердых растворов элементарных полупроводников и бинарных соединений $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$ на Si подложках, а также изучение их структурных и фотоэлектрических свойств. Эти твердые растворы с каждым годом находят всё более широкое применение в различных приборных структурах в частности, они, в основном, применяются в качестве буферного слоя, согласующего эпитаксиальную пленку другого полупроводникового материала с Si-подложкой, а также как активный материал с необходимыми параметрами. Поэтому выращивание эпитаксиальных слоев **ДВУХ-**И многокомпонентных твердых растворов на Si-подложках И изучение взаимодействия двухатомных (молекулярных) примесей в них является одной из актуальных задач современной физики полупроводников.

На сегодняшний день в мире уделяется большое внимание изучению влияния молекулярных примесей на фотоэлектрические и оптические свойства полупроводников и выявлению природы энергетических уровней молекулярных примесей в зависимости от параметров полупроводника. В связи с этим управление диапазоном фоточувствительности полупроводниковых структур с помощью молекулярных примесей, выявление механизмов фотовольтаического процесса с участием молекулярных примесей, выяснение закономерностей возникновения энергетических уровней молекулярных примесей в зависимости от параметров базового полупроводника считаются актуальным.

В Узбекистане большое внимание уделяется развитию науки, в частности, развитию технологии получения новых многофункциональных полупроводниковых материалов. В этом аспекте учеными республики получены очень важные результаты по созданию эпитаксиальных пленок на Si подложках с полным выходом на германий, арсенид галлия, фосфид галлия на поверхности пленки. В Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017-2021 годы отмечены задачи¹ «...освоение выпуска принципиально новых видов продукции и технологий, обеспечение на этой основе конкурентоспособности отечественных товаров на внешних и внутренних рынках». В этом аспекте одной из важных задач является повышение конкурентоспособности и эффективности изделий электронной промышленности путем создания новых И дешевых полупроводниковых материалов с управляемыми фотоэлектрическими свойствами с применением молекулярных примесей.

¹ Указ Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017–2021 годы» от 07 февраля 2017 г.

Данное диссертационное исследование в определённой степени соответствует задачам, обозначенным в постановлениях Президента Республики Узбекистан ПП-2772 «О мерах по дальнейшему совершенствованию управления, ускоренному развитию и диверсификации электротехнической промышленности на 2017–2021 гг.» от 13 февраля 2017 года, ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организаций, управления и финансирования научноисследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года и ПП-3855 «О дополнительных мерах по повышению эффективности коммерциализации результатов научной и научно-технической деятельности» от 14 июля 2018 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Данная исследовательская работа выполнена в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан: III. «Энергетика, энерго- и ресурсосбережение, транспорт, машино- и приборостроение».

Обзор международных научных исследований по теме диссертации². Научные исследования по выращиванию полупроводниковых твердых растворов и взаимодействию примесей в них ведутся в ведущих научных центрах и университетах мира: Массачусетский технологический институт, Государственный университет штата Огайо, Стэнфордский университет, Иллинойский университет, Исследовательский центр NASA Glenn (США), а также в Школе электроники и электротехники, Университете Лидса (Англия), в Институте полупроводниковой технологии, в Штутгартском университете, в Рейнско-Вестфальском техническом университете Ахена (Германия), в Лаборатории минералогии и кристаллографии – CNRS, в Национальной лаборатории импульсов магнитного поля (Франция), в Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе, в Институте физики A.B. Ржанова (Россия), В Технологическом полупроводников ИM. университете Тоёхаши, в Исследовательском центре интегрированной квантовой электроники, в университете Хоккайдо (Япония), в Национальном университете Чьяотун (КНР), в Физико-техническом институте и в Андижанском государственном университете (Узбекистан).

² Обзор международных научных исследований по теме диссертации проведен на основе Molecular Beam Epitaxy of III-P_yAs_{1-y} Solid Solutions: Mechanism of Composition Formation in the Sublattice of a Group V Element // Semiconductors, 2015, Vol. 49, No. 2, pp. 157–165; Peculiarities of the optical properties of wide-gap II-VI compounds with Mg isovalent impurity // Telecommunication and Radio Engineering. - 2014. Vol. 73. No.10. pp. 909–914; Application of microsize light-emitting diode structure for monolithic optoelectronic integrated circuits // Phys. Stat. Sol. (a), 2007, Vol. 204, No.6, pp.2082–2086; High-speed GaAs metal gate semiconductor field effect transistor structure grown on a composite Ge/Ge_zSi_{1-z}/Si substrate // J.Appl. Phys. 2007, 10 pp. 084501-1 – 084501-6; Optical critical points of thin-film Ge_{1-z}Sn_z alloys: A comparative Ge_{1-z}Sn_z/Ge_{1-y}Si_y study // Physical Review B. 2006. Vol.73, pp. 125207-1–125207-16; Tin-Based Group IV Semiconductors: New Platforms for Opto-and Microelectronics on Silicon // Annual Review of Materials Research. 2006, Vol. 36, pp. 497-554; Fundamental Studies of P(GeH₃)₃, As(GeH₃)₃, and Sb(GeH₃)₃: Practical n-Dopants for New Group IV Semiconductors // Chem. Mater., 2006, Vol. 18, No. 26, pp. 6266-6277 и др. источников.

В исследованиям направлении выращивания мире ПО В полупроводниковых твердых растворов и взаимодействия примесей в них получен ряд результатов, в том числе: по исследованию влияния состава на структурное совершенство буферных слоев Si_{1-v}Ge_v, выращенных на Si подложках, установлено, что при изменении концентрации атомов Ge по толщине пленки 10% Ge/мкм плотность дислокационных дефектов не превышает 2·10⁶ см⁻² (Япония, США); по исследованиям примесных уровней In в твердом растворе Pb_{1-v}Sn_vTe<In> установлено, что при у > 0.29 энергетический уровень In находится в валентной зоне (Россия); в исследованиях легирования GaAs молекулами ZnSe установлено, что кластерное легирование $(Zn-Se_4)^{3+}$ (как донор) и (Se-Zn₄)³⁻ (как акцептор) в GaAs будет стабильнее, чем моноатомное и трехатомное легирование ((Se- Zn_2Ga_2 , $(Zn-Se_2As_2)^+$) и будет способствовать внесению большого количества свободных носителей заряда (США).

В настоящее время в мире проводятся исследования взаимодействия компонентов и примесей в полупроводниковых твердых растворах в следующих перспективных направлениях: по выращиванию монокристаллических слоев соединений $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$ и их твердых растворов с плотностью дислокационных дефектов не более $2 \cdot 10^6$ см⁻² на Si подожках; монолитной интеграции оптоэлектронных приборов на основе бинарных соединений с Si технологией; изучению поведения молекулярных примесей в полупроводниках; влиянию изовалентных примесей на свойства твердых растворов.

Степень изученности проблемы. Влияние двухатомных (молекулярных) примесей на фотоэлектрические свойства полупроводниковых материалов, а также изовалентные примеси, имеющие энергетические уровни, локализованные внутри валентной зоны, мало изучены. В этом направлении учеными США L.G.Wang и Alex Zunger на основе расчетов псевдопотенциальных плоских волн получено, что энтальпия образования и длина ковалентной связи Zn-Se в решетке GaAs зависит от окружения атома Zn или от окружения атома Se. Кроме того, с учетом того факта, что длина связи Zn-Se (R_{Zn-Se}) в чистом соединении ZnSe составляет $R_{Zn-Se} = 2.42$ Å, а в тетраэдрической решетке GaAs в кластере Zn-Se₄ – $R_{Zn-Se} = 2.44$ Å, в кластере Zn-Se₃As – $R_{Zn-Se} = 2.46$ Å, в кластере Zn-Se₂As₂ – $R_{Zn-Se} = 2.49$ Å, в кластере Zn-SeAs₃ – $R_{Zn-Se} = 2.51$ Å, было показано, что чем больше атомов As вокруг примесных молекул ZnSe, тем больше длина связи Zn-Se. Однако. энергетические уровни молекул ZnSe, введенные в решетку GaAs, и влияние решетки GaAs на энергию обрыва ковалентной связи Zn-Se не изучено. Учеными Украины В.П.Махний и др. установлено, что изовалентные примеси (ИВП) Те, Se, S улучшают фотолюминесцентные свойства ZnO, а также показано, что когда электроотрицательность ИВП больше электроотрицательности замещающего атома, то примесные атомы связывают электроны и являются акцепторами, в ином случае они связывают дырки и являются донорами. Однако, энергетические уровни изовалентных атомов, а также поведение двухатомных изовалентных примесей не изучено. Российские ученые А.В.Марченко и др., изучая электронный обмен между примесными центрами в твердых растворах PbS_zSe_{1-z} , обнаружили, что атомы Sn в PbS_zSe_{1-z} как изовалентная примесь замещают атомы Pb и имеют как нейтральные Sn^{2+} , так и двукратно ионизованные Sn^{4+} донорные состояния. Выяснено, что положение примесного уровня Sn зависит от состава твердого раствора PbS_zSe_{1-z} : при $z \ge 0.5$ он находится в нижней половине запрещенной зоны, а при $z \le 0.4$ – внутри валентной зоны. В этих работах также не было исследовано влияние двухатомных (молекулярных) примесей.

Учеными Узбекистана М.С. Саидовым и А.С. Саидовым теоретически предсказано, что когда энергия обрыва ковалентной связи атомов примесных молекул больше ширины запрещенной зоны полупроводника, то энергетические уровни этих молекул находятся в валентной зоне. Ими экспериментально при 77 К обнаружен энергетический уровень молекул Ge₂ в GaAs, который расположен на 0.9 эВ ниже дна зоны проводимости GaAs. Под руководством А.С. Саидова был выращен ряд твердых растворов, в частности $(Si_2)_{1-y}(GaAs)_y$, $(Si_2)_{1-y}(GaSb)_y$, $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$, $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$, но поведение молекулярных примесей в них не было исследовано.

Несмотря на большое количество исследований по изучению поведения примесей в полупроводниках, проведенных до настоящего времени, многие важные вопросы, касающиеся влияния двухатомных (молекулярных) примесей, в особенности молекул широкозонных полупроводников, на фотоэлектрические свойства узкозонного полупроводника, энергетические уровни таких примесей, а также влияния параметров (ширина запрещенной зоны, постоянная решетки) базового полупроводника на энергию обрыва ковалентной связи атомов примесных молекул остаются нерешенными.

диссертационного исследования планами Связь С научноисследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационное исследование выполнено в рамках планов научных проектов по фундаментальным исследованиям Физико-техническо института темам: № $\Phi A - \Phi 2 - \Phi 030 + \Phi 096$ по «Выращивание твердых растворов на основе ZnS, ZnSe, ZnTe, GaSb, Si, Ge, SiC и их фотоэлектрические и люминесцентные свойства» (2007–2011); Ф2-ФА-0-43917 «Вольтаические, излучательние свойства, нанодефекты новых твёрдых растворов и гетероструктур на основе Si, Ge, GaSb, InSb, GaP, GaAs, ZnSe, ZnS, SiC, алмаза» (2012–2016).

Целью исследования является выяснение электрофизических и люминесцентных свойств новых твердых растворов, созданных на основе Si, Ge, Sn, GaAs, GaSb, InSb, ZnSe и CdS с использованием молекулярных примесей Si₂, GaAs, CdS и ZnSe, параметры которых изменяются под влиянием базового полупроводника.

Задачи исследования:

выращивание из жидкой фазы эпитаксиальных слоёв непрерывных твердых растворов (Si₂)_{1-y-z}(Ge₂)_y(GaAs)_z, (Si₂)_{1-y-z}(GaSb)_y(GaAs)_z, (Si₂)_{1-y}(CdS)_y,

 $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ на Si (111) подложках, $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$, $(GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y$ на GaAs (100) подложках;

получение структур *p*-GaAs–*n*-GaAs<Si₂>;

выяснение влияния молекул Si_2 и ZnSe на люминесцентные свойства твердых растворов (GaAs)_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> и (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05};

выявление влияния молекул Si₂ на фото- и теплогенерацию носителей заряда в *p*-GaAs–*n*-GaAs<Si₂> структурах;

выяснение влияния молекул CdS и SiC на спектральную зависимость фоточувствительности структур *p*-Si–*n*-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) и *p*-Si–*n*-(Si₂)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn₂)_z ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$);

оценка энергетических уровней молекул GaAs в твердых растворах $(Si_2)_{1-v}(GaSb)_v u (InSb)_{1-v}(Sn_2)_v;$

выявление зависимости ширины запрещенной зоны элементарных полупроводников и соединений $A^{III}B^{V}$ от их постоянной решетки, сумм ковалентных радиусов и разности электроотрицательности атомов молекул этих материалов.

Объектом исследования являются полупроводниковые твердые растворы $(Si_2)_{1-y-z}(Ge_2)_y(GaAs)_z$, $(Si_2)_{1-y}(GaSb)_y$, $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y$, $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$, $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$, $(GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y$ и *p-n*-гетероструктуры на их основе.

Предметом исследования являются процессы взаимодействия молекулярных примесей и компонентов твердых растворов, образованных на основе элементарных полупроводников и соединений $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$ в результате молекулярного замещения, а также особенности гетероструктур, создаваемых на основе таких твердых растворов.

Методы исследований. Для решения поставленных задач были применены следующие методы: рентгеновский микрозондовый анализ; дифракция рентгеновского излучения; спектральная фотолюминесценция; спектральная фоточувствительность; метод Холла, а также современные методы анализа механизмов переноса тока в полупроводниковых структурах.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

впервые показано, что молекулы GaAs нивелируют различие параметров решетки Si подложки и выращенной на ней эпитаксиальной пленки GaSb, а также образуют энергетический уровень ($E_{i,GaAs}$), расположенный в валентной зоне твердого раствора (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> – $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ эВ, что приводит к повышению фоточувствительности *p*-*n*-структур на их основе при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 1.2$ эВ;

показано, что при температуре 77 К молекулы Si₂ в твердом растворе GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> образуют энергетический уровень, расположенный в запрещенной зоне на 1.33 эВ ниже дна зоны проводимости, а также установлено, что энергия обрыва ковалентной связи Si-Si в решетке твердого раствора увеличивается на 0.17 эВ по сравнению с её значением в решетке обычного Si;

впервые обнаружен новый фототепловольтаический эффект в *p*-GaAs-*n*-GaAs<Si₂> структуре – появление фототока при совместном действии фото-

и тепловой генерации электронов и дырок с участием примесных уровней Si₂ в области примесного поглощения при энергиях фотонов 1.31 эB;

впервые показано, что молекулы CdS и SiC в твердых растворах $(Si_2)_{0.99}(CdS)_{0.01}$ и $(Si_2)_{0.96}(SiC)_{0.033}(Sn_2)_{0.007}$ образуют энергетические уровни (E_i) , расположенные в валентной зоне: $E_{i,CdS} = E_C - 2.2$ эВ и $E_{i,SiC} = E_C - 2.0$ эВ, соответственно, и приводят к повышению фоточувствительности кремниевых *p*-*n*-структур при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 2.0$ эВ;

впервые выявлено, использование двухатомных что молекул широкозонных полупроводников (GaAs, ZnSe) при получении твердых растворов на базе более узкозонных полупроводников приводит к появлению энергетических уровней расположенных $(E_i),$ валентной В зоне: В $(InSb)_{0.95}(Sn_2)_{0.05} - E_{i,GaAs} = E_C - 1.0 \ \Im B; B \ (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} - E_{i,ZnSe} = E_V - E_V E_V$ 1.16 *B*:

впервые установлено, что в кристаллической решетке GaAs при температуре 5 К энергия обрыва ковалентной связи Zn-Se уменьшается на 0.14 эВ по сравнению с её значением в обычной решетке ZnSe;

экспериментальных впервые основе результатов получены на эмпирические формулы зависимости энергии ионизации примесных молекул запрещенной ширины зоны (E_{σ}) постоянной GaAs $(E_{i,GaAs})$ ОТ И кристаллической решетки (a) в твердых растворах на основе Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb: $E_{i,GaAs}(\Im B) = 0.98 (\Im B) + 0.31 \times E_g (\Im B); E_{i,GaAs}(\Im B) = 4.27 (\Im B) - 0.50$ $(\partial B/\dot{A}) \times a(\dot{A});$

выявлено усовершенствованное выражение для обобщённого момента молекул соединений A^{III}B^V, учитывающее, в отличие от предыдущих, не только ковалентный радиус, электронную оболочечную структуру атома и эффективный заряд ядра, но и электроотрицательность атомов молекул.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

на Si (111) подложках получен эпитаксиальный слой твердого раствора $GaAs_{0.95}(Ge_2)_{0.05} < Si_2 >$, который может использоваться в качестве буферного слоя для выращивания эпитаксиальных пленок GaAs на Si подложках, что позволит удешевить производство приборов на основе GaAs и его твердых растворов;

на Si (111) подложках получен эпитаксиальный слой твердого раствора (GaSb)_{0.925}(Si₂)_{0.075}<GaAs>, который может использоваться в качестве буферного слоя для выращивания эпитаксиальных пленок GaSb на Si подложках, что позволит удешевить производство фотоэлементов на основе GaSb и его твердых растворов для термофотовольтаических систем;

изготовлена *p*-Si–*n*-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) гетероструктура, обладающая повышенной фоточувствительностью при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 2.2$ эВ, что позволяет создать солнечный элемент, эффективно работающий при более высоких температурах (~ 70-80°C).

Достоверность полученных результатов обосновывается применением современных научных методов исследования, стандартных технологических установок и высокоточного оборудования, стандартных приборов для измерения электрофизических параметров образцов, необходимой статистикой экспериментов, совпадением экспериментальных результатов с теоретическими предпосылками, подтверждением полученных результатов при сравнительном анализе с результатами других авторов, интерпретацией полученных результатов в рамках существующих апробированных физических моделей.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов работы заключается в создании новых представлений об энергетических уровнях двухатомных молекул широкозонных полупроводников, используемых при создании твердых растворов на базе более узкозонных полупроводников, а именно, показано образование энергетических уровней примесных молекул, расположенных внутри валентной зоны, при этом энергия обрыва ковалентной связи атомов этих молекул уменьшается.

Практическая значимость результатов работы определяется тем, что твердые растворы $GaAs_{0.95}(Ge_2)_{0.05}$, выращенные на Si подложках через буферный слой, состоящий из твердого раствора $(Si_2)_{1-y-z}(Ge_2)_y(GaAs)_z$ ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$), могут быть использованы в качестве подложки для создания приборов на основе бинарных соединений $A^{III}B^V$, а $(Si_2)_{1-y}(GaSb)_y < GaAs > (0 \le y \le 1)$, могут быть использованы для разработки эффективных фотоэлементов на основе соединения GaSb для термофотоэлектрических систем.

Внедрение результатов исследования. Результаты изучения взаимодействия атомов молекул примесей и компонентов твердых растворов, а также влияния молекулярных примесей на фотоэлектрические свойства структур твердых растворов были использованы при выполнении следующих научно-исследовательских работ:

закономерности нивелирования различия параметров решетки Si подложки и выращенной на ней эпитаксиальной пленки GaSb, а также образования энергетических уровеней ($E_{i,GaAs}$) примесных молекул GaAs в валентной зоне твердого раствора (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> – $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ эВ и повышения фоточувствительности *p-n*-структур на их основе при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 1.2$ эВ использованы в фундаментальном проекте «Разработки наногетероструктурных солнечных элементов и устройств фотовольтаики нового поколения», выполненном в Физико-техническом институте Российской Академии наук, для расширения спектральной фоточувствительности фотоэлементов в коротковолновую сторону (Справка № 11217-411/01/211.5 Физико-технического института Российской Академии наук от 26 апреля 2018 года). Использование научных результатов способствовало созданию фотоэлементов на основе бинарного соединения GaSb для термофотовольтаических систем;

закономерности образования энергетического уровня молекул Si₂ на 1.33 эВ ниже дна зоны проводимости твердого раствора $(GaAs)_{0.95}(Ge_2)_{0.05} < Si_2 >$ при температуре 77 К и увеличения энергии обрыва ковалентной связи Si-Si в кристаллической решетке этого твердого раствора на 0.17 эВ по сравнению с её значением в решетке обычного кремния использованы в фундаментальном проекте «Фундаментальные исследования фотокаталитических, сенсорных и адсорбционных свойств иерархических наноматериалов на основе полупроводниковых оксидов и связей между ними», выполненном в государственном университете России Пензенском для объяснения особенностей зонной структуры твердых растворов полупроводниковых оксидов (Справка № 67-367 Пензенского государственного университета от 18 мая 2018 года). Использование научных результатов позволило разработать неравновесные термодинамические модели термовольтаического эффекта, описывающие возникновение электродвижущей силы при нагреве полупроводниковых материалов без внешнего градиента температур;

закономерности нивелирования различия параметров решетки Si подложки и выращенной на ней эпитаксиальной пленки GaSb, а также образования энергетических уровеней (E_{i,GaAs}) примесных молекул GaAs в валентной зоне твердого раствора (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> – $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ эВ и молекул Si₂ в запрещенной зоне GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05} < Si₂> на 1.33 эВ ниже дна зоны проводимости были применены в акционерном обществе «FOTON» при получении пластин и обработки кристаллов полупроводниковых приборов (Справка №02-1982 от 7 сентября 2018 года АК Узэлтехсаноат). улучшить Использование научных результатов позволило токовые характеристики и повысить стабильность полевых транзисторов к внешним воздействиям;

результаты возникновению фототока В *p*-GaAs–*n*-GaAs<Si₂> ПО структуре при совместном действии фото- и тепловой генерации электронов и дырок с участием примесных уровней Si₂ в области примесного поглощения при энергиях фотонов 1.31 эВ и образованию энергетических уровней (E_i) молекул CdS и SiC в валентной зоне твердых растворов $(Si_2)_{0.99}$ (CdS)_{0.01} и $(Si_2)_{0.96}$ (SiC)_{0.033} (Sn₂)_{0.007}: $E_{i,CdS} = E_C - 2.2$ эВ и $E_{i,SiC} = E_C - 2.0$ эВ, соответственно, и как следствие - этого повышение фоточувствительности кремниевых *p*-*n*-структур при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 2.0$ эВ, использованы в фундаментальном проекте «Кванторазмерные эффекты на поверхности и в объеме легированного кремния и влияние их на процесс фотогенерации и рекомбинации носителей заряда в *p-n*-структурах», выполненном в Андижанском государственном университете, при описании тока в кремниевых процессов переноса структурах, легированных различными примесями (Справка № 89-03-1717 Министерства высшего и среднего специального образования Республики Узбекистан от 5 мая 2018 года). Использование научных результатов позволило установить особенности фотовольтаического тепловольтаического И эффектов. происходящих на поверхности легированного кремния и в *p-n*-структурах.

Апробация результатов исследования. Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 9 международных и 6 республиканских научно-практических конференциях.

Публикации результатов исследований. Основные результаты по теме диссертации опубликованы в 27 научных трудах, из них 12 статей в научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики

Узбекистан для публикаций основных научных результатов диссертационных работ, в том числе 10 статей в зарубежных международных реферируемых журналах.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованной литературы и приложений. Текст диссертации изложен на 180 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы востребованность и актуальность проблемы и темы диссертации, определена связь исследований с приоритетными направлениями развития науки и технологий республики, раскрыта степень изученности проблемы, сформулированы цели и задачи, приведены объекты, предметы и методы исследования, изложена научная новизна и практическая значимость исследования, приведены краткие сведения о внедрении результатов, апробации и публикации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

В первой главе «Современное состояние жидкофазной эпитаксии полупроводниковых твердых растворов, их применения и выяснения взаимодействия примесей в них» приведен литературный обзор по: современному состоянию теоретических и экспериментальных исследований взаимодействия атомов в многокомпонентных системах и возможности образования твердого раствора (ТР) элементами IV группы периодической системы химических элементов с соединениями А^{III}В^V и А^{II}В^{VI}, а также по применению их в практику; получению на Si подложках буферных слоев с плотностью дислокационных дефектов не более 2.10⁶ см⁻² для согласования параметров Si подложки и эпитаксиальных пленок полупроводников типа $A^{II}B^{VI}$: $A^{III}B^{V}$ И выращиванию некоторых ТР, перспективных лля оптоэлектронного приборостроения, а также изучению их структурных и электрофизических свойств; интеграции Si технологии с технологией тонких слоев полупроводниковых соединений А^ШВ^V, А^{II}В^{VI} и их ТР; взаимодействию примесей в двух и многокомпнентных системах полупроводниковых ТР.

Во второй главе «Фотоэлектрические, фототепловольтаические и люминесцентные свойства структур на основе твердых растворов (Si₂)_{1-v-} _z(Ge₂)_v(GaAs)_z, выращенных на Si подложках» приведены результаты исследований, проведенных по получению ТР (Si₂)_{1-v-z}(Ge₂)_v(GaAs)_z на Si (111) подложках из жидкой фазы ограниченного объема свинцового раствора-расплава, состоящего из Pb-Si-Ge-GaAs, а также изучению их люминесцентных и фотоэлектрических свойств. Рентгеновский микроанализ состава полученных ТР показал (см. рис. 1), что в начале эпитаксии на Si подложке растет Si подслой, далее, с увеличением толщины слоя в составе пленки концентрация атомов Si постепенно уменьшается, a Ge увеличивается. При толщинах пленки ~ 10 мкм концентрация Ge достигает до 25 мол.%, а содержание GaAs не превышает 1 мол.%. При дальнейшем охлаждении раствора-расплава, последний насыщается GaAs, 0 чем свидетельствует рост концентрации, как атомов Ge, так и молекул GaAs с дальнейшим ростом пленки, причем, при этом происходит более интенсивное замещение узлов кристаллической решётки атомами Ge. При толщине пленки ~ 18 мкм содержание Ge составляет ~ 91 мол.%, Si - 1.4 мол.%, Ga – 4.2 мол.% и As – 3.4 мол.%, т.е. образуется подслой ТР (Si₂)_{1-v-} $_{z}(Ge_{2})_{v}(GaAs)_{z}$ (0.25 $\leq y \leq 0.91$, $0 \leq z \leq 0.076$). Дальше начинается интенсивное замещение Ge узлов кристаллической решетки молекулами GaAs. При толщине пленки ~ 32 мкм концентрация GaAs доходит до 94 мол.%, а содержание Si составляет порядка 1 мол.%. При толщинах пленки в пределах от 18 до 32 мкм образуется переходной подслой из TP $(Ge_2)_{1-\nu-z}(GaAs)_{\nu}(Si_2)_z$ $(0.09 \le y \le 0.94, 0.02 \le z \le 0.01)$. Приповерхностный слой представляет собой ТР GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂>, причем в этом слое мольное содержание Si составляет менее 0.8%, т.е. Si выполняет роль примеси.





1 - Si, 2 - Ge, 3 - Ga, 4 - As.Рис. 1. Профиль распределения атомов в слое ТР $(Si_2)_{1-y-z}(Ge_2)_y(GaAs)_z$ $(0 \le y \le 0.91; 0 \le z \le 0.94)$

1 – *n*-Si–*p*-(Si₂)_{1-y-z}(Ge₂)_y(GaAs)_z (0≤y≤0.91, 0≤z≤0.94), 300 K 2 – *n*-Si–*p*-(Si₂)_{1-y-z}(Ge₂)_y(GaAs)_z (0≤y≤0.91, 0≤z≤0.94), 77 K 3 – *p*-Si–*n*-Si, 300 K.

Рис. 2. Спектральные фоточувствительности

Были исследованы спектральные зависимости фоточувствительности гетероструктуры n-Si-p-(Ge₂)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si₂)_z ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) с толщиной *p*-слоя ~ 25 мкм и контрольной структуры *p*-Si-*n*-Si с диффузионным *n*-Si слоем толщиной ~ 1 мкм (см. рис. 2), которые определялись по зависимости отношения фототока к его максимальному значению ($I_{\rm ph}/I_{\rm ph, max}$) при 300 и 77 К от энергии фотонов ($E_{\rm ph}$). Из рисунка 2 видно, что область спектральной чувствительности гетероструктуры n-Si-p-1) сдвинута в сторону длинных $(Ge_2)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si_2)_z$ (кривая волн относительно структуры p-Si-n-Si (кривая 3). Это свидетельствует об активном участии в процессе фотогенерации подслоя ТР, обогащенного Ge (см. рис. 1), ширина запрещенной зоны (E_g) которого меньше, чем E_g Si. Как видно из рисунка 2, фоточувствительность гетероструктуры *n*-Si-*p*-(Ge₂)_{1-v}- $_{z}$ (GaAs) $_{v}$ (Si₂) $_{z}$ при 77 К начинает резко возрастать с $E_{ph} = 1.21$ эВ и достигает максимального значения при $E_{ph} = 1.69$ эВ. После этого наблюдаются изгиб при 1.55 эВ и максимумы при 1.88 и 2.06 эВ, которые, вероятно, обусловлены различным составом TP (Ge₂)_{1-v-z}(GaAs)_v(Si₂)_z ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) по глубине пленки. Максимум при 1.69 эВ, в основном, обусловлен влиянием

Ge, подъем в области 1.77 – 1.88 эВ обусловлен Si, а в области $E_{\rm ph} ≥ 2$ эВ - за счет GaAs.

Был исследован спектр фотолюминесценции (ФЛ) ТР (Ge₂)_{1-v-} $_{z}(GaAs)_{y}(Si_{2})_{z}$ (0 \leq y \leq 0.91; 0 \leq z \leq 0.94) (см. рис. 3). При этом фотовозбуждение осуществлялось лазерным излучением красного света в собственной области поглощения GaAs при 77 К. Приповерхностная область представляет собой толщиной до МКМ TP замешения пленки 10 GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂>. Спектр ФЛ охватывает область излучения от 0.81 до 1.08 мкм с максимумом при 0.855 мкм, что соответствует $E_{\rm ph} = 1.45$ эВ. За этот «пик» отвечает излучательная зона-зонная рекомбинация носителей заряда в ТР GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂>, E_{g} у которого меньше, чем $E_{g,GaAs} = 1.51$ эВ и больше, чем $E_{g,Si} = 1.16$ эВ при 77 К. В спектре ФЛ при $\lambda = 0.933$ мкм выделяется сравнительно невысокий, но довольно широкий «пик», что соответствует $E_{ph} = 1.33$ эВ. Присутствие такого «пика» на фоне широкого спектра, свидетельствует о возникновении размытой полосы энергетических уровней молекул Si₂ ($E_{i,Si_{b}}$), расположенной в запрещенной зоне TP (см. рис. излучение, 4). Поскольку падающее на пленку, поглощается в приповерхностной области толщиной ~ 3 мкм, то люминесцентное излучение происходит из подслоя пленки, где основной компонентой является GaAs. Содержание Si в этом подслое составляет менее 0.8 мол.%, следовательно, размытая полоса энергетических уровней при E_{ph} = 1.33 эВ обусловлена излучательной рекомбинацией носителей заряда с участием ковалентной связи Si-Si, находящейся в окружении обогащенного GaAs подслоя решетки ТР. Энергия обрыва ковалентной связи Si-Si, находящейся в решетке обычного Si при 77 К, составляет 1.16 эВ. Однако, когда Si-Si связь находится в окружении сравнительно сильносвязанных атомов молекул GaAs, в результате гибридизации электронных оболочек атомов молекул Si₂ и GaAs энергия обрыва ковалентной связи Si-Si усиливается до $E_i = 1.33$ эВ при 77 К. Таким образом, энергия обрыва ковалентной связи Si-Si под влиянием окружающих сильносвязанных атомов молекул GaAs усиливается на величину $\Delta E = E_{i,\text{Si2}} - E_{g,\text{Si}} \approx 1.33 - 1.16 = 0.17$ эВ при 77 К.





Рис. 3. Спектр фотолюминесценции TP $(Ge_2)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si_2)_z$ $(0 \le y \le 0.91; 0 \le z \le 0.94)$ при 77 К

Рис. 4. Энергетическая зонная диаграмма TP GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> с полосой энергетических уровней E_{i,Si_2}

Для выяснения влияния примеси Si₂ на фотоэлектрические свойства GaAs была исследована спектральная зависимость фоточувствительности и температурная зависимость фототока GaAs солнечных элементов (СЭ), легированных примесями Si₂. С этой целью на *n*-GaAs подложках методом жидкофазной эпитаксии и последующей за ним газофазной диффузии цинка Zn была изготовлена *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂>–*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структура, энергетическая зонная диаграмма которой показана на рисунке 5. Также, для сопоставления полученных образцов и подтверждения влияния примеси Si₂ на свойства GaAs были исследованы контрольные структуры *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Zn>–*p*-AlGaAs<Zn>, полученные только газофазной диффузией Zn.



1 – зона–зонный электронный переход с поглощением фотона $hv \ge E_{g,GaAs}$;

2 – переход электрона с примесного уровня в зону проводимости с поглощением фотона $hv < E_{g,GaAs}$;

3 – тепловая генерация дырок.

Рис. 5. Энергетическая зонная диаграмма *n*-GaAs<Si₂>-*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структуры

Анализ зависимости спектральной фоточувствительности исследованных структур СЭ показал, что край чувствительности структур с примесями Si₂ начинался с E_{ph} ≈ 1.30 эВ и был сдвинут в сторону низких энергии фотонов, относительно контрольной структуры, у которой чувствительность начиналась с $E_{\rm ph} \approx 1.38$ эВ, что, по-видимому, происходит за счет проявления фотовольтаического эффекта примесей Si₂. На рисунке 6 приведены зависимости фототока короткого замыкания Ікз от температуры при различных значениях $E_{\rm ph}$. В области собственного поглощения, когда $E_{\rm ph}$ $\geq E_{g,GaAs}$, I_{κ_3} практически не зависит от температуры (кривые 5, 6 на рис. 6). Наоборот, в примесной области поглощения, когда $E_{\rm ph} < E_{\rm g,GaAs}$ $I_{\rm K3}$ сильно зависит от температуры (кривые 1, 2, 3, 4 на рис. 6). Это наглядно видно также из спектральной зависимости прироста фототока (I_{ph}/I_{ph}) при различных температурах (рис. 7).

Как видно из рисунка 7, максимальный прирост $I_{\rm ph}$ соответствует $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ, тогда как для значений $E_{\rm ph} > 1.45$ эВ прирост $I_{\rm ph}$ не наблюдается, а это свидетельствует о возникновении примесного фототепловольтаического эффекта в окрестности $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ. Повышение $I_{\rm ph}/I_{\rm ph(30^{\circ}C)}$ с ростом температуры при $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ обусловлено электронными переходами с примесных уровней Si₂ в зону проводимости (см. переход 2 на рис. 5) и тепловой генерацией неравновесных дырок за счет перехода электронов из

валентной зоны на уровень примесей (см. переход 3 на рис. 5). Совместное влияние фото- и тепловой генерации электронов и дырок с участием примесного уровня Si₂ приводит к повышению фототока в области примесного поглощения.



1 – 1.308 эВ; 2 – 1.344 эВ; 3 – 1.381 эВ; 4 – 1.426 эВ; 5 – 1.462 эВ; 6 – 1.505 эВ. Рис. 6. Температурные зависимости *I*_{кз}

n-GaAs<Sn>*p*-GaAs<Si₂>– *p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структуры при различных значениях энергии фотонов





Таким образом, на Si подложках можно получить слой TP с большим содержанием GaAs на поверхности пленки через переходной слой, состоящий из TP $(Ge_2)_{1-y-z}(GaAs)_y(Si_2)_z$ ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$). Энергетический уровень молекул Si₂ в TP GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}< Si₂> при 77 К расположен на 1.33 эВ ниже дна зоны проводимости. Совместное действие фото- и тепловой генерации электронов и дырок в GaAs фотоэлементах с участием примесных уровней Si₂ приводит к повышению фототока в области примесного поглощения при $E_{\rm ph} \approx 1.31$ эВ.

В третьей главе «Электрофизические и фотоэлектрические свойства структур на основе твердых растворов $(GaSb)_{1-y-z}(Si_2)_y(GaAs)_z$ и $(InSb)_1$. _v(Sn₂)_v, выращенных на монокристаллических Si и GaAs подложках» исследованы электрофизические и фотоэлектрические свойства ТР (GaSb)₁. $_{v}(Si_{2})_{v} < GaAs > (0 \le y \le 1)$ и (InSb)_{1-v}(Sn₂)_v < GaAs > (0 \le y \le 0.05) и *p-n*-структур на их основе. ТР (GaSb)_{1-v}(Si₂)_v выращивались через буферные слои (GaSb)_{0.921}(Si₂)_{0.074}(GaAs)_{0.005} на Si (111) подложках из жидкой фазы растворарасплава Sn-GaSb-GaAs-Si-Al при температуре начала кристаллизации 650°С и скорости охлаждения 1 град./мин. Выращенные пленки имели толщину \sim 10 МКМ, электронный тип проводимости с удельным сопротивлением ~ 0.01 Ом см и холловской подвижностью носителей тока ~ $170 \text{ см}^2/(B \cdot c)$. В приближении диффузионного режима переноса тока в *p*-Si-*n*- $(GaSb)_{1-y}(Si_2)_y$ ($0 \le y \le 1$) гетероструктуре оценено расчетное значение диффузионной длины ~ 4 мкм и времени жизни ~ 2.2·10⁻⁷с неосновных носителей тока – дырок в базовой области гетероструктуры n-(GaSb)_{1-v}(Si₂)_v $(0 \le y \le 1)$ при температуре 300 К.

Для выяснения роли компонентов ТР были исследованы спектральные фоточувствительности структур p-Si-n-(GaSb)_{1-v-z}(Si₂)_v(GaAs)_z. В переходной

области *p*-Si подожка и *n*-(GaSb)_{1-y}(Si₂)_y эпитаксиальная пленка содержание GaAs составляет мене 1 мол.%, т.е. молекулы GaAs ведут себя как примесь в TP (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y. Поскольку состав переходного слоя меняется по толщине пленки, мы сделали косой шлиф пленки под углом 3° и снимали фототок структуры, подавая световой зонд на различные участки. На рисунке 8 приведена спектральная фоточувствительность структуры, когда излучение подавалось на средний участок пленки по косому шлифу, где распределение компонентов составляло GaSb - 92.1 мол.%, GaAs - 0.5 мол.%, Si₂ - 7.4 мол.%.

Из рисунка 8 видно, ЧТО В спектральной зависимости фоточувствительности имеется подъем чувствительности в области высоких энергии фотонов при $E_{\rm ph} \ge 1.2$ эВ. Подъем чувствительности при $E_{\rm ph} \ge 1.2$ эВ примесями GaAs. По длинноволновому краю обусловлен подъема чувствительности можно оценить примесный уровень молекул GaAs, который составляет $E_{i,GaAs} = 1.2$ эВ. Известно, что $E_{g,GaAs} = 1.43$ эВ больше, чем E_{g,GaSb}=0.7 эВ и E_{g,Si}=1.1 эВ. Ковалентная связь между атомами молекул Ga-As прочнее, чем связь Ga-Sb и Si-Si. Однако, когда молекула GaAs замещает GaSb в решетке антимонида галлия, энергия связи Ga–As уменьшается под влиянием окружающих ее атомов молекул GaSb до значения ~ 1.2 эВ, что обусловливает возникновение примесного уровня GaAs, расположенного в валентной зоне твердого раствора $(GaSb)_{1-\nu}(Si_2)_{\nu} < GaAs > (см. рис. 9).$





Рис. 8. Спектральная зависимость фоточувствительности гетероструктуры *p*-Si-*n*-(GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs>



Фоточувствительность структуры начинается с $E_{\rm ph} \approx 1.0$ эВ, это связано с узкозонной компонентой ТР, т.е. с GaSb. Отсутствие полного поглощения в подслое, обогащенном GaSb, связано с малой толщиной этого слоя.

ТР (InSb)_{1-y}(Sn₂)_у выращивались из жидкой фазы раствора-расплава In-InSb-Sn на GaAs подложках. Слои выращивались при температурном интервале $325-250^{\circ}$ С, толщине раствора-расплава – 1 мм, скорости охлаждения – 1 град./мин. Эпитаксиальные слои имели дырочный тип проводимости. В начальный момент роста из раствора-расплава происходит кристаллизация InSb, поскольку при выбранной температуре эпитаксии раствор является насыщенным по отношению к InSb. При более низких температурах создаются условия для выращивания твердого раствора (InSb)₁. _y(Sn₂)_y, так как при этих температурах раствор-расплав не был

разбавлен GaAs, следовательно, после контакта подложки с In растворомрасплавом при заданной температуре происходит небольшое подрастворение подложки, в таком случае на начальный момент в растворе на фронте кристаллизации будут присутствовать растворенные молекулы GaAs. Исходя из принципа подобия, можно предположить, что при охлаждении растворарасплава в начальный момент роста происходит кристаллизация слоя TP (GaAs)_{1-v}(InSb)_v.

Результаты рентгеновского микроанализа и растровых картин по сколу и по поверхности показали, что эпитаксиальные слои не содержат металлических включений и распределение компонентов по поверхности эпитаксиального слоя однородное, а в объеме TP (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y - изменяется в пределах $0 \le y \le 0.05$.

В приближении диффузионного режима переноса тока в *n*-GaAs–*p*-(InSb)_{1-y}(Sn₂)_y (0 \le y \le 0.05) гетероструктуре оценено расчетное значение диффузионной длины ~ 4.2 мкм и произведение времени жизни на подвижность ~ 6.76·10⁻⁶ см²/В неосновных носителей тока – электронов в базовой области структуры – *p*-(InSb)_{1-v}(Sn₂)_v (0 \le y \le 0.05) при 300 К.

Для выяснения роли компонентов TP $(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y < GaAs > была изучена спектральная фоточувствительность$ *n*-GaAs-*p* $-(InSb)_{1-y}(Sn_2)_y < GaAs > (0 \le y \le 0.05)$ структуры (рис. 10). Из рисунка 10 видно, что фоточувствительность структуры охватывает диапазон энергии фотонов от 0.3 до 1.8 эВ.



Рис. 10. Спектральная фоточувствительность *n*-GaAs–*p*-(InSb)_{1-y}(Sn₂)_y<GaAs> (0 ≤ y ≤ 0.05) структур

В спектральной зависимости присутствует пик чувствительности в области высоких энергии фотонов при $E_{\rm ph} \ge 1$ эВ. По-видимому, подъем чувствительности при $E_{\rm ph} \geq 1$ эВ обусловлен примесями GaAs, присутствующими В переходной области между подложкой GaAs и эпитаксиальным слоем ТР (InSb)_{1-у}(Sn₂)_у. Ближе к эпитаксиальному слою (InSb)_{1-v}(Sn₂)_v<GaAs> мольное содержание GaAs составляет меньше 1%. В тетраэдрической решетке переходного слоя ТР (GaAs)_{1-у}(InSb)_у<GaAs> имеются ковалентные связи вида: Ga-As, Ga-Sb, In-As и In-Sb. Энергия обрыва этих связей характеризуется значениями запрещенных зон соответству-

ющих полупроводниковых соединений – $E_{g,GaAs} = 1.43$ эВ, $E_{g,GaSb} = 0.7$ эВ, $E_{g,InAs} = 0.35$ эВ и $E_{g,InSb} = 0.18$ эВ. Следовательно, ковалентная связь между атомами молекул Ga-As прочнее, чем связи Ga–Sb, In–As и In–Sb. Однако, когда молекула GaAs находится в окружении молекул InSb в тетраэдрической решетке TP, энергия связи Ga–As ослабляется под воздействием окружающих ее атомов молекул InSb до значения ~ 1 эВ, что, по-видимому, обусловливает возникновение примесного уровня GaAs, расположенного в валентной зоне TP – (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y (0 ≤ y ≤ 0.05). На основе спектральной зависимости коэффициента поглощения света (α) эпитаксиальной пленки по экстраполяции функциональной зависимости $\alpha^2 = f(hv)$ определялась ширина запрещенной зоны исследованного TP, которая имела значение $E_g \approx 0.072$ эВ. Следовательно, за счет Sn твердый раствор имеет более низкое значение E_g , чем InSb, у которого $E_g = 0.18$ эВ.

Были исследованы зависимости энергии ионизации примесных молекул GaAs от ширины запрещенной зоны и параметра решетки ТР на основе соединений GaAs, GaSb, InSb и элементарных полупроводников Si, Sn. C этой целью были изучены спектральные зависимости фоточувствительности гетероструктур *p*-Si-*n*-(GaSb)_{1-v}(Si₂)_v ($0 \le y \le 0.07$) (см. рис. 8) и *n*-GaAs-*p*- $(InSb)_{1-v}(Sn_2)_v$ (0 ≤ y ≤ 0.05) (см. рис. 10), легированных молекулами GaAs. В ТР мольное содержание GaAs составляло около 0.5 %. Энергия ионизации молекул GaAs ($E_{i,GaAs}$) в TP (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y и (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y оценивалась по длинноволновому краю пика чувствительности, возникающего за счет генерации электронно-дырочных пар с участием ковалентных связей Ga-As и области спектральной лежащего В коротковолновой зависимости фоточувствительности исследованных структур. $E_{i,GaAs}$ в TP (GaSb)_{1-v}(Si₂)_v составляла 1.2 эВ. Изменение значения $E_{i,GaAs}$ от $E_{g,GaAs}$, по-видимому, обусловлено гибридизацией электронных оболочек атомов молекул GaAs и GaSb в тетраэдрической решетке ТР, в частности, отличием ковалентных радиусов $R_{\text{GaAs}} = r_{\text{Ga}} + r_{\text{As}} = 2.45$ Å и $R_{\text{GaSb}} = r_{\text{Ga}} + r_{\text{Sb}} = 2.64$ Å ($R_{\text{GaAs}} < R_{\text{GaSb}}$). молекулярном замещении молекулы GaAs Поскольку при В TP подстраиваются под кристаллическую решетку GaSb, то происходит увеличение длины ковалентной связи Ga-As, и она становится больше чем 2.45 Å, что приводит к уменьшению энергии обрыва ковалентной связи Ga-As от 1.43 эВ, характерной для обычного полупроводника GaAs, до 1.2 эВ в TP $(GaSb)_{1-v-z}(Si_2)_v(GaAs)_z$ $(0 \le y \le 0.07, 0 \le z \le 0.005)$. $E_{i,GaAs}$ b TP $(InSb)_{1-v-z}(Si_2)_v(GaAs)_z$ $_{v}(Sn_{2})_{v} < GaAs > (0 \le y \le 0.05)$ составляла 1.0 эВ. Изменение значения $E_{i,GaAs}$, как и в случае ТР (GaSb)_{1-y-z}(Si₂)_y(GaAs)_z ($0 \le y \le 0.07, 0 \le z \le 0.005$), обусловлено отличием ковалентных радиусов $R_{\text{GaAs}} = 2.45$ Å и $R_{\text{InSb}} = 2.87$ Å ($R_{\text{GaAs}} < R_{\text{InSb}}$). Поскольку, $R_{\text{InSb}} = 2.87$ Å > $R_{\text{GaSb}} = 2.64$ Å, то это приводит к еще большему удлинению ковалентной связи Ga-As в твердом растворе (InSb)_{1-v-} _z(Sn₂)_v(GaAs)_z чем в случае ТР (GaSb)_{1-v-z}(Si₂)_v(GaAs)_z, что приводит к еще большему уменьшению сил взаимодействия атомов молекул GaAs и, следовательно, к еще большему уменьшению энергии обрыва ковалентной связи Ga-As. Таким образом, значение Ei.GaAs зависит от состава базового материала. На рисунках 11 и 12 показаны зависимости энергии E_{i.GaAs} от ширины запрещенной зоны (Eg) и постоянной решетки (a) базового полупроводника, соответственно. Из рисунка 11 видно, что с уменьшением E_g наблюдается уменьшение E_{i,GaAs}. Анализ рисунка 11 показывает, что $E_{i,GaAs}$ от E_g является линейной, аппроксимация зависимость этой зависимости на прямую линию дала следующий эмпирический вид функциональной зависимости:

$$E_{i,\text{GaAs}}(\Im B) = 0.98\,(\Im B) + 0.31 \times E_g\,(\Im B).$$
(1)

Изменение В различных полупроводниках, $E_{i,\text{GaAs}}$ по-видимому, обусловлено деформацией молекул GaAs под действием окружающих атомов кристаллической решетки. Для минимизации потенциальной энергии кристаллической решетки примесные молекулы упругих напряжений подстраиваются в решетке, что приводит к изменению расстояния между атомами Ga и As. Следовательно, изменяются сила взаимодействия и энергия взаимодействия атомов молекул GaAs, в результате чего изменится энергия обрыва ковалентной связи Ga-As. Это подтверждается уменьшением E_{i,GaAs} с ростом постоянной решетки полупроводниковых материалов, которое показано на рисунке 12. Экспериментальные точки, приведенные на рисунке 12, ложатся на прямую линию. Аппроксимация этих точек дала следующий эмпирический вид зависимости E_{i.GaAs} от постоянной решетки:

$$E_{i,\text{GaAs}}(\Im B) = 4.27 (\Im B) - 0.50 (\Im B/\text{Å}) \times a(\text{Å}).$$
 (2)





Рис. 11. Зависимость энергии ионизации примесных молекул GaAs от ширины запрещенной зоны полупроводника

Рис. 12. Зависимость энергии ионизации примесных молекул GaAs от постоянной решетки (*a*, Å) полупроводника

Учитывая отличия типов кристаллических решеток и доли ковалентной и ионной связи в элементарных полупроводниках и полупроводниковых соединениях $A^{IV}B^{IV}$, $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$, а также отличие сил взаимодействия ионных остовов с валентными электронами, можно предположить, что зависимости (1) и (2), по-видимому, будут правомерны только в том случае, когда молекулы GaAs находятся в TP на основе Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb.

В четвертой главе «Электрофизические и фотоэлектрические свойства структур на основе твердых растворов $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ и $Si_{1-y-z}C_ySn_z$, полученных на монокристаллических Si подложках» исследованы электрофизические свойства TP $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ ($0 \le y \le 0.01$), $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ и *p-n*-структуры на их основе. TP $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ выращивались на Si (111) подложках из жидкой фазы раствора-расплава Sn-Si-CdS при скорости охлаждения 1 град./мин., температуре начала кристаллизации 1150 °C, и при толщине раствора-расплава 1 мм. Эпитаксиальные слои имели электронный тип проводимости, удельное сопротивление 16 мОм·см, подвижность носителей тока ~ 300 см²/В·с при температуре 300 К и толщину 25 мкм.

Структурное исследование методом рентгеновской дифракции показало, что слои TP (Si₂)_{1-y}(CdS)_y (0 \leq y \leq 0.01) имеют монокристаллическую структуру с ориентацией (111). В пленке содержатся нанокристаллы фазы CdS с ориентацией (111) и размерами субкристаллитов 62 нм. В пленке имеются неоднородно распределённые упругие микронапряжения ростового характера, вызванные различием ионных радиусов кремния ($r_{Si}^{4+} = 0.42$ Å), кадмия ($r_{Cd}^{2+} = 0.97$ Å) и серы ($r_{S}^{2-} = 1.81$ Å).

На основе анализа результатов экспоненциального участка вольтамперной характеристики p-Si-n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) структур рассчитаны значения диффузионной длины 13.2 мкм и времени жизни $4.5 \cdot 10^{-7}$ с неосновных носителей тока – дырок в базе n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y исследованной структуры. Показано, что между Si подложкой и эпитаксиальной пленкой появляется переходной высокоомный слой из TP (Si₂)_{1-y}(CdS)_y с удельным сопротивлением $6.7 \cdot 10^7$ Ом·см, в котором концентрация свободных носителей тока составляет ~ $3.1 \cdot 10^8$ см⁻³ при комнатной температуре.



1 - p-Si-n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$). 2 - p-Si-n-Si.

Рис. 13. Спектральные зависимости фоточувствительности структур



Рис. 14. Энергетическая зонная диаграмма ТР (Si₂)_{1-y}(CdS)_y (0 ≤ *y* ≤ 0.01)

На рисунке 13 показаны фоточувствительности исследованной *p*-Si–*n*- $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ ($0 \le y \le 0.01$) и контрольной *p*-Si–*n*-Si структур при различных энергиях фотонов. Как видно из рисунка 13, чувствительность исследованной структуры начинается с энергии фотонов $E_{ph} = 1.14$ эВ и на 0.1 эВ сдвинута в сторону коротких волн по сравнению с кремниевой *p*-Si–*n*-Si структурой. Наблюдается подъем чувствительности при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 2.2$ эВ, который обусловлен обрывами ковалентных связей молекул сульфида кадмия (CdS), находящихся в кристаллической решетке TP (Si₂)_{1-y}(CdS)_y.

Молекулы CdS в TP $(Si_2)_{1-y}(CdS)_y$ ($0 \le y \le 0.01$) образуют локальные энергетические уровни, расположенные в валентной зоне на 2.2 эВ ниже дна зоны проводимости TP (см. рис. 14), что приводит к возникновению примесного фотовольтаического эффекта и к повышению фоточувствительности структуры в области высоких энергии фотонов.

ТР $Si_{1-y-z}C_ySn_z$ были выращены на Si (111) подложках из жидкой фазы Sn раствора-расплава, насыщенного техническим кремнием марки КРЗ при

толщине раствора-расплава 1 мм, температуре начала кристаллизации 1050°С и скорости охлаждения 1 град./мин. Эпитаксиальные пленки имели толщину ~ 35 мкм, электронный тип проводимости с удельным сопротивлением ~ 500 мОм·см.

На рисунке 15 показаны профили распределения атомов компонентов ТР, полученные рентгеновским микрозондовым анализом. Из рисунка 15 видно, что в слое ТР присутствуют атомы С и Sn. В переходной области подложка-пленка толщиной ~ 5-7 мкм содержание атомов С постепенно увеличивается до ~ 4.5 мол.%, а затем с ростом пленки при толщинах до 25 мкм медленно уменьшается до ~ 3 мол.%. Содержание Sn в слое колеблется в пределах 0.6-0.86 мол.%. Отличие сумм ковалентных радиусов атомов молекул Si₂ и SiSn составляет 9.8%. Однако отличие сумм ковалентных радиусов атомов молекул Si₂ и SiC составляет 17%, что гораздо больше, чем TP замещения. По-видимому, предел возможности образования В техническом кремнии марки КРЗ содержатся примеси карбида кремния кубической модификации (*β*-SiC) типа цинковой обманки. При выращивании ТР с уменьшением температуры раствор-расплав насытится не только по отношению к Si, но и по отношению к SiC. Следовательно, молекулы SiC входят в пленку, образуя субкристаллиты SiC. Поскольку кристаллическая решетка Si – кубическая алмазоподобная, то вероятность растворения SiC кубической модификации (*β*-SiC) в решетке Si гораздо больше, чем его других модификаций (4H SiC, 6H SiC). В случае когерентного расположения наноразмерных субкристаллитов *β*-SiC деформация кристаллической будет не существенной, что обеспечивает решетки Si большую концентрацию атомов углерода в эпитаксиальном слое, как это наблюдается в эксперименте. Отличие сумм ковалентных радиусов атомов молекул Si₂ (r_{si} $+r_{Si} = 2.34$ Å) и SnC ($r_{Sn} + r_{C} = 2.17$ Å) составляет ~ 7.2%. Следовательно, замещение некоторых атомных узлов Si атомами Sn в подрешетке SiC энергетически более выгодно, чем замещения в подрешетке Si₂. Такое замещение атомов Si и Sn способствует возникновению небольшого содержания Sn в эпитаксиальном слое, что и наблюдается в эксперименте.

Исследование спектральной зависимости фоточувствительности *p*-Si-*n*- $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) и *p*-Si-*n*-Si структур показало (см. рис. 16), что длинноволновый край у этих структур идентичный. В отличие от Si структур в *p*-Si-*n*- $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ структурах наблюдается подъем чувствительности при энергиях фотонов $E_{ph} \ge 2$ эВ, обусловленный обрывами ковалентных связей Si-C. Молекулы SiC в TP образуют энергетический уровень, локализованный в валентной зоне на 2 эВ ниже дна зоны проводимости TP $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$). Энергия обрыва ковалентной связи Si-C в полупроводниковом соединении β -SiC составляет 2.36 эВ, а в твердом растворе $(Si_2)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn_2)_z$ ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) под влиянием атомов кремния она уменьшается до 2 эВ.

Таким образом, молекулы CdS и SiC в TP на основе Si образуют энергетические уровни, расположенные внутри валентной зоны TP, и приводят к повышению чувствительности структур в области высоких энергии фотонов, что важно для разработки эффективных СЭ.





1 - p-Si-n-(Si₂)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn₂)_z ($0 \le y \le 0.045$; $0 \le z \le 0.008$) 2 - p-Si-n-Si.

1 – Si, 2 – C, 3 – Sn. Рис. 15. Профиль распределения атомов в ТР (Si₂)_{1-y-z}(SiC)_y(Sn₂)_z

Рис. 16. Спектральные фоточувствительности структур

В пятой главе «Структурные, электрофизические и люминесцентные свойства эпитаксиальных слоев твердых растворов (GaAs)_{1.v}(ZnSe)_v, выращенных на GaAs подложках» исследованы структурные, электрофизические и люминесцентные свойства ТР (GaAs)_{1-v}(ZnSe)_v. ТР были выращены на GaAs (100) подложках из жидкой фазы Sn-GaAs-ZnSe раствора-расплава при температуре начала кристаллизации 710°С, толщине раствора-расплава 1 мм, и скорости охлаждения 1 град./мин. Пленки имели дырочный тип проводимости с концентрацией свободных носителей тока (3см⁻³. В зависимости от параметров процесса роста толщина $5) \cdot 10^{18}$ 10 мкм. На основе результатов выращенных пленок составляла ДО рентгеновского микрозондового анализа определено распределение молярного содержания молекул ТР по толщине слоя (рис. 17). Из рисунка 17





видно, что с ростом толщины пленки до 0.6 мкм содержание ZnSe в TP сначало быстро растет и достигает своего максимального значения – 80 мол.%, что объясняется высокой насыщенностью раствора-расплава селенидом цинка на фронте кристаллизации. Градиент концентрации молекул ZnSe в этом слое составляет ~ 13 мол.% ZnSe/0.1 мкм. Дальше содержание ZnSe быстро спадает до толщины 1.8 мкм с градиентом 5.8 мол.% ZnSe/0.1 мкм, а затем медленно – 0.25 мол.% ZnSe/0.1 мкм, достигая значения 4 мол.% в приповерхностной области пленки. На глуби-

не до 2 мкм от поверхности пленки мольное содержание ZnSe не превышает 10 мол.%.

Исследование рентгеновской дифрактограммы показало, что пленки являются монокристаллическими с ориентацией (100). Получено значение постоянной решетки пленки - $a_f = 5.6544$ Å и подложки - $a_s = 5.6465$ Å.

Для изучения влияния молекул ZnSe на фотоэлектрические свойства TP (GaAs)_{1-v}(ZnSe)_v был исследован спектр ФЛ поверхности эпитаксиальной пленки (см. рис. 18). Возбуждение ФЛ производилось лазерным излучением с длиной волны 325 нм при 5 К. Спектр ФЛ охватывает диапазон длин волн от 0.40 до 0.76 мкм с узким пиком излучения при $\lambda_{\text{max}} = 465$ нм (2.67 эВ). Поскольку Eg GaAs и ZnSe при температуре 5 К составляют 1.51 и 2.81 эВ соответственно, то пик при λ_{max} , по-видимому, обусловлен излучением фотонов с участием электронных переходов на уровни ZnSe ($E_{iZnSe} = 2.67$ эВ). Явное выделение пика излучения на фоне широкого спектра свидетельствует о возникновении размытой полосы энергетического уровня $(\Delta E_{i,\text{ZnSe}})$, расположенной в валентной зоне TP (GaAs)_{1-v}(ZnSe)_v (0 $\leq y \leq 0.05$) (см. рис. 19). Подаваемое лазерное излучение с энергией 3.82 эВ практически полностью поглощается на приповерхностной области эпитаксиального слоя толщиной ~ 1 мкм, следовательно, люминесцентное излучение происходит из подслоя пленки, где мольное содержание ZnSe составляет ~ 4÷5 %. Размытая полоса энергетических уровней обусловлена связями Zn-Se, находящимися в тетраэдрической решетке матрицы арсенида галлия. Ширина размытия энергетических уровней, оцененная по полуширине пика люминесцентного излучения, составляет 0.09 эВ.



Рис. 18. Спектр фотолюминесценции пленок твердого раствора (GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y при температуре 5 К





Энергия обрыва ковалентной связи Zn-Se, находящейся в тетраэдрической решетке соединений ZnSe, совпадает со значением ширины запрещенной зоны материала и составляет при 5 К 2.81 эВ. Однако, как показывают результаты ФЛ, когда молекулы ZnSe находятся в кристаллической решетке GaAs, под влиянием окружающих атомов базового полупроводника энергия обрыва связи Zn-Se уменьшается до 2.67 эВ. На основе расчетов псевдопотенциальных плоских волн теоритически показано³, что длина связи Zn-Se (R_{Zn-Se}) в материале GaAs зависит от окружающих его атомов. С учетом значения R_{Zn-Se} в чистом соединении ZnSe равном $R_{Zn-Se} = 2.42$ Å, получено, что в тетраэдрической решетке GaAs, когда примесный атом Zn окружен 4-

³ Wang L.G. and Alex Zunger Dilute. Nonisovalent (II-VI)-(III-V) Semiconductor Alloys: Monodoping, Codoping, and Cluster Doping in ZnSe-GaAs // Physical Review B. 2003. Vol. 68, 125211 pp. 1-8.

мя атомами Se, т.е. в кластере Zn-Se₄, ее значение составляет $R_{Zn-Se} = 2.44$ Å, в кластере Zn-Se₃As – $R_{Zn-Se} = 2.46$ Å, в кластере Zn-Se₂As₂ – $R_{Zn-Se} = 2.49$ Å, в кластере Zn-SeAs₃ – $R_{Zn-Se} = 2.51$ Å. Аналогично, когда примесный атом Se в GaAs окружен 4-мя атомами Zn, т.е. в кластере Se-Zn₄, значение R_{Zn-Se} составляет $R_{Zn-Se} = 2.42$ Å, в кластере Se-Zn₃Ga – $R_{Zn-Se} = 2.45$ Å, в кластере Se-Zn₂Ga₂ – $R_{Zn-Se} = 2.48$ Å, в кластере Se-ZnGa₃ – $R_{Zn-Se} = 2.51$ Å. Видно, что длина связи Zn-Se тем больше, чем больше она окружена атомами GaAs, как для катионного, так и для анионного узла. По-видимому, уменьшение энергии обрыва ковалентной связи Zn-Se $E_{i,ZnSe}$ в GaAs обусловлено увеличением длины связи. С ростом R_{Zn-Se} взаимодействие атомов Zn и Se ослабляется, что приводит к уменьшению $E_{i,ZnSe}$. Энергия ионизации молекул ZnSe в TP (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} $E_{i,ZnSe} = 2.67$ эВ больше, чем ширина запрещенной зоны TP, следовательно, энергетический уровень молекул ZnSe расположен в валентной зоне TP (рис. 19).

При малых концентрациях содержания ZnSe в TP (GaAs)_{1-y}(ZnSe)_y изменение ширины запрещенной зоны ТР (E_{g,GaAsZnSe}) не существенное. В пределах $0 \le y \le 0.1$ изменение $E_{g,GaAsZnSe}$ составляет не более 0.25%, т.е. она меняется. Это обусловлено практически не низкой возможностью кластеризации Zn+Se в GaAs. С учетом этого можно оценить расположение молекул ZnSe энергетического уровня В валентной зоне TP $(GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05}: \Delta E_{i,ZnSe} = E_{ph} - E_{g,GaAsZnSe} = 2.67 - 1.51 = 1.16$ 3B, T.e. уровень $E_{i,ZnSe}$ располагается на 1.16 эВ ниже потолка валентной зоны ТР.

С целью изучения взаимодействия примесей и атомов молекул в двух- и многокомпонентных ТР были исследованы зависимости E_g и статической диэлектрической проницаемости (СДП) от таких первичных фундаментальных параметров материала как суммы ковалентных радиусов и электроотрицательностей атомов молекул элементарных полупроводников и соединений $A^{III}B^{V}$. Одним из важных энергетических параметров атома в ТР является обобщенный момент (ОМ)- *m*, введенный В.К.Семенченко, который характеризует силовое поле иона зарядом *q*, валентностью *z* и радиусом *r*:

$$m = \frac{q \cdot z}{r} \,. \tag{3}$$

ОМ, как первичная величина, показывает реакцию иона на молекулярное поле кристалла. А.С. Саидов с учетом электронной оболочечной структуры атома и эффективного заряда ядра предложил выражение для ОМ в следующем виде:

$$m^* = \frac{(A - \gamma) \cdot e}{r_u} - \frac{1}{2} \cdot a_o q \frac{n^* (n^* - 1)}{r_u^2} , \qquad (4),$$

где A – порядковый номер элемента в Периодической системе химических элементов, γ – коэффициент экранировки, r_u – кристаллографический радиус иона, a_o – боровский радиус, n^* – эффективное главное квантовое число. ОМ

молекул соединения AB оценивается среднеарифметическим значением OM компонентов A и B с соответствующей наивысшей валентностю:

$$m_{AB}^* = \frac{m_A^* + m_A^*}{2} \,. \tag{5}$$

В выражениях (4) и (5) не учитывается электроотрицательность атомов молекул AB ($\Delta \chi = |\chi_A - \chi_B|$). Однако с ростом величины $\Delta \chi$ в молекуле AB растет доля ионной составляющей химической связи, что приводит к увеличению энергии связи. Следовательно, с изменением Δχ должны изменяться энергетические параметры полупроводника, в частности $E_{\rm g}$. На рисунке 20 показана зависимость E_{g} от $\Delta \chi = |\chi_{A^{III}} - \chi_{B^{V}}|$. Как видно из рисунка 20, наблюдается общая тенденция возрастания $E_{\rm g}$ с ростом $\Delta \chi$. Однако для полупроводников близких значениях $\Delta \chi$, видно некоторых при существенное отличие значений $E_{\rm g}$, например, для InAs ($\Delta \chi_{\rm InAs} = 0.40, E_{\rm g} =$ 0.35 эВ) и InP ($\Delta \chi_{InP} = 0.41, E_g = 1.34$ эВ), а также для GaAs ($\Delta \chi_{GaAs} = 0.37, E_g$ = 1.43 эВ) и GaP ($\Delta \chi_{GaP} = 0.38, E_g = 2.27$ эВ). Это возможно обусловлено отличием сумм ковалентных радиусов атомов молекул $R = r_{A^{III}} + r_{B^{V}}$: $R_{InAs} =$ 2.687 Å, $R_{InP} = 2.597$ Å, а также $R_{GaAs} = 2.45$ Å, $R_{GaP} = 2.36$ Å, т.е. при очень близком значении $\Delta \chi$ наблюдается увеличение $E_{\rm g}$ с уменьшением $R = r_{A^{\rm HI}} + r_{B^{\rm V}}$. Чем меньше межатомное расстояние, тем сильнее химическая связь. Это утверждение подтверждает зависимость E_{g} от $R = r_{A} + r_{B}$, приведенная на рисунке 21. Разброс точек на рисунке 21, как указывалось выше, обусловлен различными значениями Δχ для различных молекул.







Рис. 21. Зависимость ширины запрещенной зоны от r_A + r_B атомов молекул А^{IV}В^{IV} и А^{III}В^V

Закономерность совместного влияния $\Delta \chi$ и *R* на $E_{\rm g}$ полупроводника можно проанализировать с помощью зависимости $\Delta \chi$ от *R* с учетом $E_{\rm g}$, приведенной на рисунке 22. Как видно из рисунка 22, $E_{\rm g}$ увеличивается с

ростом $\Delta \chi$ при постоянном значении $r_{A^{III}} + r_{B^V}$ (стрелки вверх на рис. 22) и с уменьшением $r_{A^{III}} + r_{B^V}$ при постоянном $\Delta \chi$ (стрелки налево на рис. 22).

Основываясь на этих фактах, при оценке ОМ молекул учитывалась разность электроотрицательности $\Delta \chi = |\chi_{A^{IV}} - \chi_{B^{IV}}|$ и $\Delta \chi = |\chi_{A^{III}} - \chi_{B^{V}}|$ в следующем виде:

$$m_{AB}^{**} = \frac{((A - \gamma)_A + (A - \gamma)_B - 0.35) \cdot q \cdot (1 + \Delta \chi)}{r_A + r_B}.$$
 (6)

По нашему мнению, m_{AB}^{**} выражает потенциал на поверхности сферы двухатомной молекулы с радиусом $R = r_A + r_B$ и эффективным зарядом $((A - \gamma)_A + (A - \gamma)_B - 0.35) \cdot q$ и учитывает долю ионной связи. Чем больше отличается $\Delta \chi$ атомов молекул, тем сильнее ее энергетические характерис-



Рис. 22. Зависимость $\Delta \chi$ от $r_A + r_B$ атомов молекул $A^{III}B^V$

тики при постоянных значениях $R = r_A + r_B$ эффективного И заряда ядра. Из (6) следует, что потенциал гетерополярной связи сильнее, чем гомополярной. Поэтому можно ожидать, что величина m_{AB}^{***} будет выражать индивидуальные свойства молекул точнее, чем *m* и m_{AB}^* и она будет проявляться в межмолекулярном взаимодействии многокомпонентных Как систем. видно из рисунков 21 и 22, с ростом $R = r_{III} + r_V$ уменьшается E_{g} , т.е. уменьшается энергия об-

рыва ковалентной связи атомов, что, по-видимому, обусловлено уменьшением потенциальной энергии взаимодействия атомов с ростом расстояния между ними. Такой вывод подтверждают экспериментально полученные результаты об изменении энергии обрыва ковалентной связи Si-Si в GaAs, Ga-As в (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y и в (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y, Cd-S и Si-C в Si, а также Zn-Se в GaAs.

Таким образом, наряду с геометрическими факторами, эффективными зарядами, типами электронной оболочки учет электроотрицательности атомов позволяет более корректно описать электрофизические, в особенности энергетические свойства полупроводников на основе первичных фундаментальных параметров атомов химических элементов, что внесет свой вклад в развитие молекулярно-статистической теории растворов. На основе проведенных исследований по изучению влияние молекул Si₂, GaAs, ZnSe, CdS, SiC на фотовольтаические, фототепловольтаические и излучательные свойства TP на основе Si, Ge, Sn, GaAs, GaSb, InSb, ZnSe, CdS, SiC и *p*-*n*-структур, созданных на их базе, сделаны следующие выводы:

1. Выявлено, что молекулы широкозонных полупроводников в сравнительно более узкозонном полупроводнике образуют примесный энергетический уровень, локализованный в валентной зоне, а молекулы узкозонных полупроводников в широкозонном полупроводнике образуют примесный энергетический уровень в запрещенной зоне.

2. Впервые выяснено, что энергия обрыва ковалентной связи атомов молекул широкозонных полупроводников в кристаллической решетке узкозонного полупроводника уменьшается по сравнению с её значением в обычном широкозонном полупроводнике, а энергия обрыва ковалентной связи атомов молекул узкозонных полупроводников в кристаллической решетке широкозонного полупроводника увеличивается по сравнению с её значением в обычном в обычном полупроводника увеличивается по сравнению с её значению с её значению с её значением в кристаллической решетке широкозонного полупроводника увеличивается по сравнению с её значением в обычном узкозонном полупроводнике.

3. Показано, что примесные молекулы GaAs приводят к повышению фоточувствительности *p-n*-структур, изготовленных на основе твердых растворов, полученных на базе Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb, в коротковолновой области спектра излучения ($hv \ge 1.0$ эВ), молекулы GaAs образуют энергетические уровни, локализованные в валентной зоне твердых растворов (GaSb)_{1-y}(Si₂)_y<GaAs> и (InSb)_{1-y}(Sn₂)_y<GaAs>, причем с ростом ширины запрещенной зоны твердого раствора наблюдается увеличение энергии обрыва ковалентной связи Ga-As, а с ростом постоянной кристаллической решетки наблюдается её уменьшение.

4. Выяснено, что в спектре фотолюминесценции твердого раствора GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> при температуре 77 К появляется пик при энергиях фотонов 1.33 эВ, который обусловлен энергетическими уровнями примесных молекул Si₂, расположенных в запрещенной зоне твердого раствора.

5. Доказано повышение фототока *n*-GaAs<Sn>–*p*-GaAs<Si₂>–*p*-Al_{0.65}Ga_{0.35}As<Si₂> структуры с ростом температуры в примесной области поглощения при энергиях фотонов 1.31 эВ за счет совместного действия фото- и тепловой генерации электронов и дырок с участием энергетических уровней примесных молекул Si₂, расположенных в запрещенной зоне.

6. Показано, что повышение фоточувствительности p-Si-n-(Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$) структур в коротковолновой области спектра излучения при энергиях фотонов $hv \ge 2.2$ эВ обусловлено энергетическими уровнями молекул CdS, локализованными в валентной зоне твердого раствора (Si₂)_{1-y}(CdS)_y ($0 \le y \le 0.01$), причем энергия обрыва ковалентной связи атомов молекул CdS, находящихся в кристаллической решетке твердого раствора (Si₂)_{1-y}(CdS)_y уменьшается по сравнению с её значением в кристаллической решетке обычного соединения CdS.

7. Впервые выяснено, что за счет молекул ZnSe, энергетические уровни которых локализованы в валентной зоне, в спектре фотолюминесценции твердого раствора (GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} при температуре 5 К появляется узкий пик при энергиях фотонов 2.67 эВ, причем энергия обрыва ковалентной связи атомов молекул ZnSe, находящихся в кристаллической решетке твердого раствора уменьшается по сравнению с её значением в кристаллической решетке обычного соединения ZnSe.

8. Показано, что учёт электроотрицательности атомов соединений $A^{III}B^{V}$, наряду с учетом размеров ковалентных радиусов и электронной оболочечной структуры атомов, а также эффективного заряда ядра, позволяет объяснить экспериментально установленную зависимость ширины запрещенной зоны от обобщенного момента молекул этих материалов и предложено выражение для обобщенного момента молекул, учитывающее электроотрицательности атомов.

9. Твердые растворы, полученные на основе Si и соединений CdS и SiC и обладающие рядом преимуществ по сравнению с обычным кремнием, рекомендованы для разработки солнечных элементов, имеющих диапазон фоточувствительности, расширенный в коротковолновую область спектра излучения, и эффективно работающих при более высоких температурах.

10. Твердый раствор (Si₂)_{1-у-z}(GaSb)_x(GaAs)_z, являющийся буферным слоем при выращивании эпитаксиальной пленки GaSb на Si подложке, и обладающий более высокой фоточувствительностью по сравнению с GaSb рекомендован как перспективный материал для разработки эффективных фотоэлементов.

SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARDING OF SCIENTIFIC DEGREES DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 AT PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE

USMONOV SHUKRULLO NEGMATOVICH

INTERACTION OF IMPURITIES IN SOLID SOLUTIONS BASED ON SILICON, GALLIUM ARSENIDE, SELENIDE-ZINC, SULPHIDE-CADMIUM AND THE ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF HETEROSTRUCTURES OBTAINED ON THEIR BASIS

01.04.10-Physics of semiconductors

DISSERTATION ABSTRACT OF THE DOCTOR OF SCIENCE (DSc) ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

The theme of the doctoral dissertation (DSc) was registered by the Supreme Attestation Commission under the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2017.1.DSc/FM44.

Dissertation has been prepared at Physical-technical institute.

The abstract of the dissertation was posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the website of the Scientific Council at www.fti.uz and on the website of «ZiyoNet» informational and educational portal at www.ziyonet.uz.

Scientific consultant:	Saidov Amin Safarbayevich doctor of sciences in physics and mathematics, professor
Official opponents:	Andreev Vyacheslav Mikhailovich doctor of sciences in technical sciences, professor, corresponding member Russian Academy of Sciences
	Gulyamov Gafur doctor of sciences in physics and mathematics, professor
	Aripov Khayrullo Kabulovich doctor of sciences in physics and mathematics, professor
Leading organization:	The National University of Uzbekistan

The defense of the dissertation will be held on «____» ___2018 at ____at the meeting of the Scientific Council No. DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 at the Physical-technical institute (Address: 100084, Uzbekistan, Tashkent, Chingiz Aytmatov street, 2 "B". Phone/fax: (+99871) 235-42-91, e-mail: ftikans@uzsci.net).

The doctoral dissertation can be looked through in the Information Resource Centre at the Physicaltechnical institute (registered under No. 233) (Address: 100084, Uzbekistan, Tashkent, Chingiz Aytmatov street, 2 "B". Phone/fax: (+99871) 235-30-41).

Abstract of dissertation was distributed on «____» ____2018.

(Mailing report No. ____ on «____» ____2018).

N.R. Avezova

Chairman of the Scientific Council on Award of Scientific Degrees, Doctor of Technical Sciences

O.A. Abdulkhaev

Scientific Secretary of the Scientific Council on Award of Scientific Degrees, PhD in Physics and Mathematics

A.Abdurahmanov

Chairman of the Scientific Seminar of the Scientific Council on Award of Scientific Degrees, Doctor of Technical Sciences, Professor

INTRODUCTION (abstract of DSc thesis)

Actuality and demand of the theme of dissertation. Currently one of the most important trends in the development of modern semiconductor physics is the search for ways to integrate silicon (Si) technology with the technology of binary compounds $A^{II}B^{V}$ and $A^{II}B^{VI}$ in order to reduce their production costs. In this direction it is very important to obtain solid solutions of elementary semiconductors and binary compounds $A^{III}B^{V}$ and $A^{II}B^{VI}$ on Si substrates as well as to study their structural and photoelectric properties. Every year such solid solutions find more and more wide application in various device structures. They are mainly used as a buffer layer that matches the epitaxial film of another semiconductor material with Si substrate, and also as an active material with the necessary electrophysical parameters. In this connection the growth of epitaxial layers of two- and multicomponent solid solutions on Si substrates and the study of the interaction of diatomic (molecular) impurities in them is one of the actual problems of modern semiconductor physics.

Degree of knowledge of the problem. The influence of molecular impurities on the electrical properties of semiconductors as well as isovalent impurities, which have energy levels localized within the valence band, have been studied not enough. In this direction scientists of USA L.G.Wang and Alex Zunger based on the calculations of pseudo potential plane waves have obtained that the enthalpy of formation and the length of the covalent bond of Zn-Se in the lattice of GaAs depends on the environment of the Zn atom or on the environment of the Se atom. The scientists of Ukraine V.P. Makhny and others ascertained that the isovalent impurities Te, Se, S improve the photoluminescent properties of ZnO. Russian scientists A.V. Marchenko and others studied the electronic exchange between impurity centers in solid solutions of $PbS_{\nu}Se_{1-\nu}$, found that the position of the impurity level of Sn depends on the composition of the solid solution PbS_vSe_{1-v}. Scientists of Uzbekistan M.S.Saidov and A.S.Saidov predicted that when the energy of termination of covalent bonding of atoms of impurity molecules is greater than the width of the forbidden band of a semiconductor the energy levels of these molecules are in the valence band.

The aim of research work is to reveal the electrophysical and luminescent properties of new solid solutions created on the base Si, Ge, Sn, GaAs, GaSb, InSb, ZnSe and CdS using molecular impurities of Si₂, GaAs, CdS and ZnSe whose parameters are change under the influence of the base semiconductor.

Scientific novelty of research consists of the following:

it was first shown that the GaAs molecules level the difference between the parameters of lattice of the Si substrate and the GaSb epitaxial film grown on it, and also form the energy level ($E_{i,GaAs}$) located in the valence band of the solid solution (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> - $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ eV. That leads to increase of the photosensitivity of *p*-*n*-structures based on them at photon energies $E_{ph} \ge 1.2$ eV;

it is shown that at a temperature of 77 K the Si_2 molecules in the $GaAs_{0.95}(Ge_2)_{0.05} < Si_2 >$ solid solution form an energy level located in the band gap

1.33 eV below the bottom of the conduction band, and it is also established that the energy of destruction of the covalent Si-Si bond in the lattice of the solid solution increases by 0.17 eV compared to its value in the lattice of ordinary Si;

for the first time a new photothermal-voltaic effect in the *p*-GaAs–*n*-GaAs<Si₂> structure was discovered - the appearance of a photocurrent under the combined action of photo- and thermal generation of electrons and holes with the participation of impurity levels of Si₂ in the impurity absorption region at a photon energy of 1.31 eV;

it was shown for the first time that the CdS and SiC molecules in $(Si_2)_{0.99}(CdS)_{0.01}$ and $(Si_2)_{0.96}(SiC)_{0.033}(Sn_2)_{0.007}$ solid solutions form energy levels (E_i) located in the valence band: $E_{i,CdS} = E_C - 2.2$ eV and $E_{i,SiC} = E_C - 2.0$ eV, respectively, and lead to an increase of the photosensitivity of silicon *p*-*n*-structures at photon energies $E_{ph} \ge 2.0$ eV;

it was ascertained for the first time that the use of diatomic molecules of wide-gap semiconductors (GaAs, ZnSe) of the manufacture of solid solutions based on more narrow-gap semiconductors leads to the appearance of energy levels (E_i) located in the valence band: in $(InSb)_{0.95}(Sn_2)_{0.05} - E_{i,GaAs} = E_C - 1.0 \text{ eV}$; in $(GaAs)_{0.95}(ZnSe)_{0.05} - E_{i,ZnSe} = E_V - 1.16 \text{ eV}$;

it was ascertained for the first time that in the crystal lattice of GaAs at the temperature 5 K the energy of destruction of the covalent Zn-Se bond decreases by 0.14 eV compared to its value in the lattice of ordinary ZnSe;

for the first time, on the basis of experimental results, empirical formulas for the dependence of the ionization energy of impurity molecules GaAs ($E_{i,GaAs}$) on the band gap (E_g) and crystal lattice constant (*a*) in solid solutions on the base Si, Sn, GaAs, GaSb, InSb: $E_{i,GaAs}$ (eV) = 0.98 (eV) + 0.31× E_g (eV); $E_{i,GaAs}$ (eV) = 4.27 (eV) - 0.50 (eV/Å)×*a* (Å) were obtained;

the more improved expression for the generalized moment of the molecules of compounds $A^{III}B^V$ is revealed, which, unlike the previous ones, takes into account not only the covalent radius, the electron shell structure of the atom and the effective charge of the nucleus, but also the electronegativity of the atoms of molecular.

Scientific and practical significance of the research results.

The scientific significance of the results of the work is creation of new ideas about the energy levels of diatomic molecules of wide-band semiconductors used in the creation of solid solutions on the base of narrower-gap semiconductors, namely, the appearance of the energy levels of impurity molecules located inside the valence band, while the energy of destruction of the covalent bond of these atoms molecules decreases, has been shown.

The practical significance of the results of the work is determined by the fact that solid solutions of GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05} grown on the Si substrates through the buffer layer consisting of the solid solution $(Si_2)_{1-y-z}(Ge_2)_y(GaAs)_z$ ($0 \le y \le 0.91$; $0 \le z \le 0.94$) can be used as the substrate for creating devices based on binary compounds $A^{III}B^{V}$.

Application of the research results. The results of studying the interaction of atoms of impurity molecules and components of solid solutions as well as the

effect of molecular impurities on the photoelectric properties of structures of solid solutions were used in the following scientific research:

regularities of leveling the difference of the lattice parameters of the Si substrate and the GaSb epitaxial film grown on it, as well as the formation of energy levels ($E_{i,GaAs}$) of GaAs impurity molecules in the valence band of the (GaSb)_{0.93}(Si₂)_{0.07}<GaAs> solid solution – $E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ eV and enhancement of photosensitivity of p-n-structures based on them at photon energies $E_{ph} \ge 1.2$ eV were used in the fundamental project "Development of nanoheterostructural solar cells and photovoltaic devices of the new generation", carried out at the Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, for the expansion of the spectral photo-sensitivity photocells to shorter wavelengths (Reference No. 11217-411/01/211.5 of Physical-Technical Institute of the Russian Academy of the Russian Academy of Sciences on April 26, 2018). The use of scientific results contributed to the creation of photocells based on the binary compound GaSb for thermophotovoltaic systems;

regularities of formation of the energy level of Si₂ molecules by 1.33 eV below the bottom of the conduction band of the solid solution $(GaAs)_{0.95}(Ge_2)_{0.05}$ $<Si_2>$ at 77 K and an increase in the energy of destruction of the covalent Si-Si bond in the crystal lattice of this solid solution by 0.17 eV in comparison with its value in the lattice of ordinary silicon used in the fundamental project "Fundamental studies of photocatalytic, sensory and adsorption properties of hierarchical nanomaterials based on semiconductor oxides and bonds between them", carried out in Penza State University of Russia to explain the features of the band structure of solid solutions of semiconductor oxides (Reference No. 67-367 of Penza State University on May 18, 2018). The use of scientific results allowed to develop non-equilibrium thermodynamic models of the thermovoltaic effect, describing the appearance of an electromotive force during heating of semiconductor materials without an external temperature gradient;

regularities of leveling the difference of the lattice parameters of Si substrate and the GaSb epitaxial film grown on it as well as the formation of energy levels $(E_{i,GaAs})$ of GaAs impurity molecules in the valence band of the $(GaSb)_{0.93}(Si_2)_{0.07}$ <GaAs> solid solution $-E_{i,GaAs} = E_C - 1.2$ eV and Si₂ molecules in the band gap of GaAs_{0.95}(Ge₂)_{0.05}<Si₂> 1.33 eV below the bottom of the conduction band were used in the joint-stock company "FOTON" at producing wafers and processing semiconductor device crystals (Reference No. 02-1982 of Joint-Stock Company Uzeltekhsanoat on September 7, 2018). The use of scientific results allowed to improve the current characteristics and increase the stability of field-effect transistors to external influences.

Structure and volume of dissertation. The dissertation consists of an introduction, five chapters, conclusion, a list of used references and applications. The text of the dissertation is printed on 180 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

1. Usmonov Sh.N. Influence of GaAs Molecules on the Photosensitivity of p-Si–n-(GaSb)_{1-x}(Si₂)_x and n-GaAs–p-(InSb)_{1-x}(Sn₂)_x Heterostructures // Applied Solar Energy. – New York, 2016. – Vol.52, No.3. – pp. 211-214. (N \leq 41, SCImago, IF=0.279).

2. Saidov A.S., Usmonov Sh.N., Saidov M.S. Liquid-phase epitaxy of the $(Si_2)_{1-x-y}(Ge_2)_x(GaAs)_y$ substitutional solid solution $(0 \le x \le 0.91, 0 \le y \le 0.94)$ and their electrophysical properties // Semiconductors. – New York, 2015. – Vol.49, No.4. – pp.547-550. (No11. Springer, IF=0.672).

3. Usmonov Sh.N., Saidov A.S., Leiderman A.Yu. Effect of Injection Depletion in *p*-*n* Heterostructures Based on Solid Solutions $(Si_2)_{1-x-y}(Ge_2)_x(GaAs)_y$, $(Si_2)_{1-x}(CdS)_x$, $(InSb)_{1-x}(Sn_2)_x$, and $CdTe_{1-x}S_x$ // Physics of the Solid State. – New York, 2014. – Vol.56, No.12. – pp.2401–2407. (No11. Springer, IF=0.925).

4. Усмонов Ш.Н. Структурное исследование твердого раствора $(Si_2)_{1-x}(CdS)_x$ ($0 \le x \le 0.01$) // Доклады Академии наук Республики Узбекистан. – Ташкент, 2014. – №3. – С.28-31. (01.00.00, №7).

5. Saidov A.S., Usmonov Sh.N., Kalanov M.U., Kurmantayev A.N., and Bahtybayev A.N. Structural and Some Electrophysical Properties of the Solid Solutions $Si_{1-x}Sn_x$ ($0 \le x \le 0.04$) // Physics of the Solid State. – New York, 2013. – Vol.55, No.1. – pp.36–44. (No11. Springer, IF=0.925).

6. Saidov A.S., Saidov M.S., Usmonov Sh.N., Leiderman A.Yu., Kalanov M.U., Gaimnazarov K.G., Kurmantaev A.N. Growth of $(GaAs)_{1-x}(ZnSe)_x$ Solid Solution Films and Investigation of Their Structural and Some Photoelectric Properties // Physics of the Solid State. – New York, 2011. – Vol.53, No.10. – pp.2012–2021. (No11. Springer, IF=0.925).

7. Saidov A.S., Saidov M.S., Usmonov Sh.N., Asatova U.P. Growth of $(InSb)_{1-x}(Sn_2)_x$ Films on GaAs Substrates by Liquid-Phase Epitaxy // Semiconductors. – New York, 2010. – Vol.44, No.7. – pp.938–945. (No11. Springer, IF=0.672).

8. Usmonov Sh.N., Mirsagatov Sh.A., and Leyderman A.Yu. Study of the Current–Voltage Characteristic of the n-CdS/p-CdTe Heterostructure Depending on Temperature // Semiconductors. – New York, 2010. – Vol.44, No.3. – pp.313–317. (№11. Springer, IF=0.672).

9. Saidov A.S., Usmonov Sh.N., Leyderman A.Yu., Amonov K.A. Influence of gamma-irradiations on photo-electric parameters of p-Si-n-(Si₂)_{1-x}(CdS)_x and p-Si-n-(Si₂)_{1-x}(ZnSe)_x - structures // Uzbek Journal of Physics. – Tashkent, 2010. – Vol.12, No.4-6. – pp.378-383. (01.00.00, №5).

10. Saidov A.S., Saidov M.S., Usmonov Sh.N., Kholikov K.T., Saparov D. Photosensitivity of p-Si-n-(GaSb)_{1-x-y}(Si₂)_x(GaAs)_y, p-Si-n-(GaSb)_{1-x-y}(Si₂)_x(GaAs)_y-n-(GaSb) structures // Applied Solar Energy. – New York, 2008. – Vol.44, No.3. – pp.188–189. (№41, SCImago, IF=0.279).

11. Kutlimratov A., Saidov M.S., Saidov A.S., Usmonov Sh.N., Kholikov K.T. Photothermovoltaic Effect of the Si₂ Impurities in the Gallium Arsenide Solar Cell // Applied Solar Energy. – New York, 2006. – Vol.42, No.3. – pp.5-7. (№41, SCImago, IF=0.279).

12. Saidov A.S., Usmonov Sh.N., Saidov M.S., Saparov D. Growth and Photosensitivity of an Epitaxial C–Doped Si Layer // Applied Solar Energy. – New York, 2005. – Vol.41, No.2. – pp.80–82. (№41, SCImago, IF=0.279).

II бўлим (II часть; II part)

13. Саидов А.С., Усмонов Ш.Н., Бахтибаева С.А. Спектральная зависимость коэффициента поглощения твердого раствора $(InSb)_{1-x}(Sn_2)_x$ ($0 \le x \le 0.05$) // Тезисы докладов V международной конференции «Актуальные проблемы молекулярной спектроскопии конденсированных сред». 22-24 сентября 2016. –Самарканд, 2016. –С.76-77.

14. Саидов А.С., Усмонов Ш.Н., Саидов М.С. Влияние примеси GaAs на фотоэлектрические свойства твердых растворов (InSb)_{1-x}(Sn₂)_x и (GaSb)_{1-X-}_y(Si₂)_x(GaAs)_y // Сборник тезисов докладов международной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики». 5-6 ноября 2015.– Ташкент, 2015.–С.136-138.

15. Саидов А.С., Усмонов Ш.Н., Саидов М.С. Вольт-амперная характеристика гетероструктур *n*-Si-*p*-(Si₂)_{1-x-y}(Ge₂)_x(GaAs)_y ($0 \le x \le 0.91, 0 \le y \le 0.94$) // Материалы республиканской конференции «Современные проблемы физики полупроводников» СПФП-2015. 26-27 октября 2015. – Нукус, 2015. – С.9–10.

16. Саидов М.С., Саидов А.С., Усмонов Ш.Н. Твердые растворы замещения многокомпонентных полупроводниковых соединений с валентнозонными изовалентными примесями и примесные вольтаические эффекты в p-n- структурах на их основе // Сборник обзорных научных статей республиканской конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики», посвященной 100-летию академика С.А. Азимова. 6-7 нобря 2014.–Ташкент, 2014. –С.73-86.

17. Саидов А.С., Усмонов Ш.Н., Сапаров Д.В.Синтез твердых растворов замещения на основе элементарных полупроводников и полупроводниковых соединений А^ШВ^V и А^{II}В^{VI} методом жидкофазной эпитаксии // Сборник обзорных научных статей республиканской конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики», посвященной 100-летию академика С.А. Азимова. 6-7 нобря 2014.– Ташкент, 2014.–С.114-130.

18. Usmonov Sh.N., Saidov A.S. Structural and photoelectric properties of the solid solution $(Si_2)_{1-x}(CdS)_x$ ($0 \le x \le 0.01$) // «Applied Sciences and technologies in the United States and Europe: common challenges and scientific findings»: proceedings of the 6th International scientific conference. Cibunet Publishing. 21April 2014.–New York, 2014 USA.–pp.142-144.

19. Усмонов Ш.Н., Саидов А.С. Влияние изовалентных примесей на фотоэлектрические свойства твердых растворов $(Si_2)_{1-x}(CdS)_x$ ($0 \le x \le 0.01$),

 $(Si_2)_{1-x}(CSn)_x (0 \le x \le 0.005), (InSb)_{1-x}(Sn)_x (0 \le x \le 0.05), (GaAs)_{1-x}(ZnSe)_x (0 \le x \le 0.80)$ // Сборник материалов: II Всероссийской конференции «Наноструктурированные материалы и преобразовательные устройства для солнечной энергетики 3-го поколения». 22-24 мая 2014. – Чебоксары, 2014 Россия, 2014. – С.111-114.

20. Усмонов Ш.Н. Жидкофазная эпитаксия кремниевого слоя из металлургического кремния // Материалы 51 - Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». 12-18 апреля 2013.–Новосибирск, 2013.–С. 56.

21. Усмонов Ш.Н., Каланов М., Шерматов Т.Ю. Структурное исследование твердого раствора $(Si_2)_{1-x}(CdS)_x$ ($0 \le x \le 0.01$) // Тезисы докладов 3-международной научной конференции «Физика и физическое образование: достижения и перспективы развития», посвященной 70-летию академика НАН КР Аманбека Жайнаковича Жайнакова. 19-25 августа 2011. – Бишкек, 2011 Кыргызская Республика.–С.53-54.

22. Усмонов Ш.Н., Мирсагатов Ш.А., Амонов К.А. Влияние температуры на вольтамперные характеристики nCdS/pCdTe – структур // Сборник тезисов 5-Республиканской конференции по «Физической электроники» посвященной 100-летию со дня рождения У.А. Арифова. 28-30 октября 2009. – Ташкент, 2009. – С.122.

23. Усмонов Ш.Н., Саидов А.С., Асатова У.П. Исследование вольтамперной характеристики nGaAs– $p(InSb)_{1-x}(Sn_2)_x$ ($0 \le x \le 0.05$) гетероструктур // Сборник тезисов 5-Республиканской конференции по «Физической электроники» посвященной 100-летию со дня рождения У.А. Арифова. 28-30 октября 2009. – Ташкент, 2009.–С.123.

24. Усмонов Ш.Н. Фотовольтаический эффект изовалентных примесей в кремнии // Материалы Республиканской конференции «Современная физика и ее перспективы» посвященной 50-летию Физического факультета Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека. 12-13 ноября 2009.–Ташкент, 2009.–С.230-232.

25. Усмонов Ш.Н. Примесный уровень Si₂ галлий // В арсенид международной конференции «Неравновесные Материалы процессы В полупроводниковых полупроводниках И В структурах». 1-3 февраля 2007.-Ташкент, 2007.-С. 57.

26. Usmonov Sh.N. Temperature dependence of dark current of $pSi-n(Si_2)_{1-x}(CdS)_x$ structures // Thesis of fifth Int. Conf. «Magnetic and Superconducting materials MSM 07». 25-30 September 2007.–Urganch-Khiva, Uzbekistan 2007.–pp.66.

27. Усмонов Ш.Н. Температурная зависимость фототока GaAs солнечных элементов, легированных примесями Si₂ // Материалы международной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики» посвященной 15-летию независимости Узбекистан. 26-27октября 2006.–Ташкент, 2006.–С. 300-301.

Автореферат «Тил ва адабиёт таълими» журнали тахририятида тахрирдан ўтказилди (18.07.2018 йил).

Босишга рухсат этилди: 12.10.2018 йил Бичими 60х45 ¹/₈, «Times New Roman» гарнитурада рақамли босма усулида босилди. Шартли босма табоғи 4,2. Адади: 100. Буюртма: № 307.

Ўзбекистон Республикаси ИИВ Академияси, 100197, Тошкент, Интизор кўчаси, 68.

«АКАДЕМИЯ НОШИРЛИК МАРКАЗИ» Давлат унитар корхонасида чоп этилди.