

**ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ, АСТРОНОМИЯ ИНСТИТУТИ
ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ
ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.27.06.2017.FM/T.33.01 РАҚАМЛИ
ИЛМИЙ КЕНГАШ**

ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ

НОРМУРОДОВ АСРОР БАЗАРОВИЧ

**МОДЕЛЛАШТИРИЛГАН КРЕМНИЙ НАНОЗАРРАЛАРИНИНГ
ТУЗИЛИШИ ВА ЭЛЕКТРОН ХУСУСИЯТИ**

01.04.07 – конденсирланган ҳолат физикаси

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2019

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD) по
физико-математическим наукам**

**Contents of the dissertation abstract of the doctor of philosophy (PhD) on
physical and mathematical sciences**

Нормуродов Асрор Базарович

Моделлаштирилган кремний нанозарраларининг тузилиши ва
электрон хусусияти..... 3

Нормуродов Асрор Базарович

Структура и электронные свойства моделированных наночастиц
кремния..... 21

Normurodov Asror Bazarovich

Structure and electron properties of simulated silicon
nanoparticles..... 39

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ

List of published works..... 46

**ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ, АСТРОНОМИЯ ИНСТИТУТИ
ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ
ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.27.06.2017.FM/T.33.01 РАҚАМЛИ
ИЛМИЙ КЕНГАШ**

ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ

НОРМУРОДОВ АСРОР БАЗАРОВИЧ

**МОДЕЛЛАШТИРИЛГАН КРЕМНИЙ НАНОЗАРРАЛАРИНИНГ
ТУЗИЛИШИ ВА ЭЛЕКТРОН ХУСУСИЯТИ**

01.04.07 – конденсирланган ҳолат физикаси

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2019

Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида № В2018.4.PhD/FM294 рақами билан рўйхатга олинган.

Диссертация Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси Ядро физикаси институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифаси (www.inp.uz) ва «Ziynet» ахборот-таълим порталида (www.ziynet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:	Ташметов Маннаб Юсупович физика-математика фанлари доктори, профессор
Расмий оппонентлар:	Джуманов Сафарали физика-математика фанлари доктори, профессор Гулямов Гафур физика-математика фанлари доктори, профессор
Етакчи ташкилот:	Муҳаммад Ал-Хоразмий номидаги Тошкент ахборот технологиялари университети

Диссертация ҳимояси Ядро физикаси институти, Астрономия институти, Ўзбекистон Миллий университети ҳузуридаги DSc.27.06.2017.FM/T.33.01 рақамли Илмий кенгашининг 2019 йил _____ соат _____ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100174, Тошкент шаҳри, Улугбек қўрғони, Ядро физикаси институти. Тел. (+99871) 289-31-18; факс (+99871) 289-36-65; e-mail: info@inp.uz).

Диссертация билан Ядро физикаси институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (_____ рақами билан рўйхатга олинган). (Манзил: 100214, Тошкент шаҳри, Улугбек қўрғони, ЯФИ. Тел. (+99871) 289-31-19).

Диссертация автореферати 2019 йил « ____ » _____ куни тарқатилди.
(2019 йил “ ____ ” _____ даги _____ рақамли реестр баённомаси)

И.Нуритдинов

Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш раиси в.в.б.
ф.-м.ф.д., профессор

Э.М.Турсунов

Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш илмий котиби ф.-м.ф.д.,
катта илмий ходим

И. Нуритдинов

Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш ҳузуридаги илмий семинар раиси
ф.-м.ф.д., профессор

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертациясининг аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Ҳозирги пайтда дунёда турли яримўтказгичлар ва уларнинг бирикмаларида ҳосил қилинган нанозарраларнинг хоссаларини ўрганиш – материалшунослик ва замонавий қаттиқ жисмлар наноэлектроникасининг устувор йўналишларидан бири бўлиб ҳисобланади. Ўтказилган назарий ва тажрибавий тадқиқотлар, яримўтказгич кристалларда нанозарраларнинг ҳосил бўлиш жараёнларини компьютерда моделлаштириш нанозарраларни олишнинг технологик усуллари ва уларни ҳосил бўлиши вақтида юз берадиган физик жараёнлар ҳамда кристалл тузилишларининг барқарорлигидан бошлаб то янги хоссаларга эга бўлган нанокристалларни олиш ва улар асосида янги авлод асбоблари ва қурилмаларини ишлаб чиқишгача бўлган барча босқичларни қамраб олади. Ҳалқаро илмий нашрларда яримўтказгич нанозарраларнинг параметрлари ва хоссаларини ўрганиш бўйича қатор таҳлилий мақолалар чоп этилган. Бу ишлар, асосан, нанозарралар ва нанотузилмалар бўйича бажарилган илмий тажрибалар натижаларига таянади, айни пайтда, нанотузилмаларнинг параметрларини компьютерда моделлаштириш усуллари қўллаб назарий ҳисоблаш уларнинг кўпгина хоссаларини олдиндан айтиб бериш имконини беради.

Бугунги кунда компьютерда моделлаштириш соҳасида олиб борилаётган тадқиқотлар нанокристалларни ўрганишнинг нисбатан янги ва долзарб йўналишларидан бири саналади ва ҳосил қилинган нанозарраларнинг энг мақбул параметрларини олдиндан айтиб бериш ва топиш имконини беради. Монокристалл кремний замонавий микро- ва наноэлектрониканинг асосий материалларидан биридир. Агар базавий материалда чекланган ўлчамли кичик кластерлар ҳосил бўлиш эҳтимоли ҳисобга олинса, унда таркибида бундай кластерлар бўлган тузилмаларга янги типдаги материал сифатида қаралиши керак, улар атом ва молекуляр физикада кузатиладиган хоссаларга ҳам, конденсирланган ҳолатда кузатиладиган хоссаларга ҳам эга бўлади. Шунинг учун, кластерлар ҳосил бўлиши жараёнларини, уларнинг структуравий ва энергетик параметрларини ҳамда электрон хоссаларини компьютерда моделлаштириш усуллари ёрдамида ўрганиш наноматериалшуносликнинг долзарб йўналишларидан бири ҳисобланади.

Республикамызда таркибида нанотузилмалар бўлган материаллар олишнинг фундаментал асосларини ўрганишга катта аҳамият берилмоқда. Тадқиқ қилинаётган материаллар матрицаида нанокристаллар ҳосил қилиш улар асосида оптоэлектроника, фотоника ва яримўтказгичлар электроникаси учун турли асбоблар яратиш, шунингдек, бу йўналишда жаҳон стандартлари даражасида фундаментал тадқиқотлар олиб бориш имконини беради. Кремний нанозарралари бўйича олинган фундаментал натижалар катта аҳамиятга эга ва мамлакатимизда фанни ривожлантириш, уни амалиётга қўллашнинг 2017–2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини янада ривож-

лантириш учун Ҳаракатлар Стратегияси¹ да акс эттирилган мақсадларини амалга оширишга хизмат қилади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 2 февралдаги ПФ–4947-сон «2017–2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар Стратегияси тўғрисида», 2017 йил 16 февралдаги ПФ–4958-сон «Олий ўқув юртидан кейинги таълим тизимини янада такомиллаштириш тўғрисида»ги Фармонлари, 2017 йил 17 февралдаги ПҚ–2789-сон «Фанлар Академияси фаолияти, илмий-тадқиқотни ташкил қилиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида»ги Қарори ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишда ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялари ривожланишининг II. «Энергетика, энергия ва ресурс тежамкорлиги» устувор йўналиши доирасида бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Кремнийнинг кичик нанозарралари соҳасида ҳозирги вақтда, жаҳоннинг бир қатор таниқли олимлари, жумладан ҳиндистонлик (К. Рагхавачари), америкалик (L.A. Куртис, G. Belomoin, S.E. Douglas, M.T. Swihart), хитойлик (J.C. Yang), россиялик (А.А. Кузубов), туркиялик (M. Durandurdu), япониялик (Y. Watanabe) ва ўзбекистонлик олимлар томонидан экспериментал ва назарий тадқиқотлар олиб борилмоқда.

Нанозарраларнинг куртак ҳолати деб қараладиган $\text{Si}_2\text{--Si}_8$ кичик кластерлар ноэмпирик Хартри–Фок усулида қутбланган $6\text{--}31\text{G}^*$ базавий жамланмани қўллаб тадқиқ қилинган; бу кластерларнинг зарядланган ҳолатлари моделлаштирилган; 20 атомлигача кластерлар ичи ковак тузилишининг барқарорлиги кўрсатиб берилган. Кремний ўлчамлари ~ 1 нм ли кичик нанозарраларининг люминесцент хоссаларига эгаллиги кашф қилиниши 29 атомли зарра моделини қабул қилиш имконини берган. Сиртни барқарорлаштириш ва унинг кластер хоссаларига таъсири муаммоси сиртни водород ва бошқа реагентлар билан тўйинтириш йўли билан реконструкция қилиш бўйича қатор илмий ишлар амалга оширилишига олиб келди, кремний нанозарраларини ўстиришда водород муҳим аҳамиятга эгаллиги кўрсатилган. Бироқ ҳозиргача кластер сиртининг яқуний модели масаласи ҳал этилмаганлиги боис экспериментал ва назарий ишларни янада ривожлантириш талаб этилади. Шу билан бирга водород фақат сиртнинг пассиватори бўлиб қолмасдан, кластернинг ичида мустақил нуқсонли ҳолатлар ҳам ҳосил қилади.

Кремний нанозарраларининг энергетик характеристикаларини назарий ҳисоблашлар илгари яримэмпирик ва эмпирик усулларда бажариларди, бу

¹ Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сон «2017–2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги Фармони.

эса сифат жиҳатда ишончли (микдорий эмас) натижалар берарди. Айни вақтда, бирламчи тамойилларга асосланган (*ab initio*) усулларнинг ҳисоблаш харажатлари ҳозирги вақтгача жуда юқорилигича қолмоқда, яъни *ab initio* усуллари кўпчилик тузилишлар учун қўллаб бўлмайди. Ўзбек олимлари (А.Ш. Маҳмудов, З.М. Ҳакимов, Ф.Т. Умарова, А.П. Мухторовлар) томонидан ишлаб чиқилган ва ривожлантирилган ностандарт кучли боғланиш усулининг (НКБУ) молекуляр динамика (МД) усули билан биргаликда қўллаш ёрдамида олинган натижалари *ab initio* усулларда олинган ҳисоблаш натижалари билан солиштирса бўладиган аниқликда, 50 тагача атомдан иборат кремний кластерларини моделлаштириш имконини берди.

НКБУ нинг кейинги ривож ва таркибида нуқсонлар ва киритма атомлар бўлган кластерларга қўлланиши нафақат кичик кремний нанозарраларини тадқиқ қилишни бир тизимга келтириш, кенгайтириш ва чуқурлаштириш имконини беради, балки компьютерда моделлаштиришга мазкур ёндашувни экспериментал ишлардаги муаммоларни ҳал қилишга қўллаш имкониятларини оширади.

Диссертация тадқиқотининг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасаси илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация иши Ядро физикаси институти илмий-тадқиқот ишлари режасининг ФА-Ф2-Ф066+Ф072 “Таркибида кичик ўлчамли наноконпозициялар ва нанозарралар бўлган яримўтказгич материалларнинг тузилиши ва хоссалари” (2007-2011); Ф2-ФА-Ф121 “Бир жинсли бўлмаган микрохолатларнинг шаклланиши ва уларнинг нейтронлар ёрдамида легирланган кремнийнинг гидрогенлаш пайтида фундаментал хоссаларига таъсири” (2012-2016); ОТ-Ф2-20 “Легирланган кремнийда радиация таъсирида юз берадиган кичик ўлчамли структура ўзгаришлари ва уларнинг монокристалл хоссаларига таъсири” (2017-2020) лойиҳалари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади кремний кластерларининг геометрик ва структура параметрларини назарий ҳисоблашлар асосида компьютер моделларини тузиш, оптималлаш ва нуқсонли ҳолатларнинг шакллантирилган нанозарралар хоссалари ва барқарорлигига таъсирини ўрганишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

Si₂-Si₈ кичик кластерларни ва гидрогенланган Si₂H₄-Si₈H₁₆ кластерларни компьютерда моделлаштириш;

29 ва 38 та атомлардан иборат наноўлчамли идеал кремний кластерларини квант-кимёвий моделлаштириш;

Si₂₉ ва Si₃₈ кремний кластерлари сиртлари моделларини тузиш, сиртни реконструкция қилиш ва сиртда атомлар димерланишини тадқиқ қилиш;

Кремний ичи ковак Si₁₂-Si₃₆ кластерларининг барқарор конфигурацияларини ўрганиш;

Si₂₉ ва Si₃₈ кремний кластерлари сиртларини водород атомлари билан пассивация қилишнинг уларнинг барқарорлигига таъсирини ўрганиш;

кремний кластерларининг тузилиши ва барқарорлигига киритмаларнинг таъсирини текшириш.

Тадқиқотнинг объекти сифатида 38 тагача атомлардан иборат наноўлчамли кремний кластерлари олинган.

Тадқиқотнинг предмети наноўлчамли кремний кластерларининг структура ва энергетик параметрлари ҳамда электрон хоссаларидан иборат.

Тадқиқотнинг усуллари. Мувофиқлаштирилган ностандарт кучли боғланиш усули молекуляр динамика усули билан комбинацияда қўлланган. Ушбу усулнинг танланишига сабаб НКБУнинг *ab initio* усуллар даражасидаги ҳисоблаш натижаларини олиш ва етарлича катта ўлчамли кластерларни моделлаштириш имконини беришидир.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

Si₃-Si₈ типидagi кремний кластерлари учун учбурчакли тузилиш ва унинг асосдаги фазовий конфигурациялар характерли, гидрогенланган кичик кластерлар учун эса олмоссимон геометрия характерли бўлган тетраэдрик боғларга эга циклик шаклларга ўтувчи тармоқланган структуралар кузатилиши аниқланган;

асосида тўрт, беш ва еттита атомдан иборат тўғри кўпбурчаклар ётадиган кластерлар ўсиш жараёнининг оптимизациясидан кейин ичи ковак тузилишини сақлаб қолмаслиги, гексагонал асосли кластерлар учун эса кремнийнинг ичи ковак кластерларининг барқарор ўсиши сақланиб қолиши кўрсатилган;

илк бор кластер структураларининг сирт ҳолатига сезгирлиги аниқланган ва сиртдаги орбиталларни водород билан пассивация ва сиртни реконструкция қилиш Si₂₉ ва Si₃₈ кремний кластерларининг геометрик ўлчамлари ва электрон структураларини мос равишда 0.71-1.09 нм оралиғида, таъқиқланган зона кенглигини эса 1.02-2.85 эВ оралиғида ўзгартириши кўрсатилган;

Si₂₉H₂₄ кластер ичидаги вакансия Si₂₉ дагига нисбатан барқарор экани ва вакансия атрофидаги узилган боғларни водород билан тўлиқ тўйинтириш кластерларнинг дастлабки конфигурациясини сақлаган ҳолда барқарор VN4 комплекс шаклланишига олиб келиши топилган;

ичида вакансияси бўлган кластерларда водород атомлари сонини 4 тагача ошириб борилганда тақиқланган зона кенглигининг 0,98 эВ гача ошиб бориши, водород атомларидан бири уч марказли Si-H-Si боғ ҳосил қилиши, айна вақтда қолган водород атомлари кремний атомларига қаттиқ боғланиб ковалент қутбланган боғлар ҳосил қилиши аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

ностандарт кучли боғланиш усули ковалент боғланишли нанозарраларни тадқиқ қилишда геометрик тузилиш, боғланиш энергиялари, ионланиш потенциаллари, электронга тўйиниш энергиялари ва тақиқланган зона кенглигини ҳисоблаш ҳамда нанозарралар ҳосил бўлишининг компьютердаги моделларини тузишда самарали қўлланиши мумкинлиги кўрсатилган;

$\text{Si}_2\text{-Si}_5$ кластерларда $U(-)$ Андерсон ҳодисаси, яъни нейтрал ҳолат структурасининг манфий ва мусбат зарядланган ҳолатларга нисбатан беқарорлиги кузатилиши топилган;

нейтрал ва мусбат зарядланган кластерларда водород кластер ичидаги гексагонал тугунлараро ҳолат ва тугунлараро марказий нукта ўртасида барқарор ўрнашиши кўрсатилган;

тоза Si_{29} кластерда углероднинг мавжуд бўлиши саёз энергетик сатҳлар пайдо бўлишига, таркибида углерод бўлган кремний кластерлари ичига водороднинг киритилиши углерод-водород нуқсон комплекси ҳосил бўлишига олиб келиши аниқланган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги нанозарралар ўлчамлари ва тузилишларини ҳисоблаш натижаларининг адабиётларда келтирилган натижаларга мос келиши, мустақил усулларнинг қўлланиши ва олинган маълумотларнинг мавжуд физикавий тамойиллар ҳамда тушунчаларга жавоб бериши билан асосланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти олиб борилган квант-кимёвий тадқиқотлар нанотехнологияларнинг илмий асосларини яратиш учун зарур бўлиб, уларни яратиш ва амалга оширишни жадаллаштиришга хизмат қилади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти кремнийнинг наноўлчамли кластерлари шакли, сирт тузилишлари ва нуқсонларини компьютерда моделлаштириш усуллари ёрдамида ҳисоблашлар натижалари кремний нанозарраларининг барқарор шакллари олдиндан айтиб бериш, нанозарра ва наноиплар шаклланиш жараёнларини бошқариш, электроника ва фотоника учун керакли хоссаларга эга, киритма атомли кремний нанокристалл кластерларини олиш имконини бериши билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Моделлаштирилган кремний нанозарралари структуралари ва электрон хоссаларини аниқлашдан олинган натижалар асосида:

соф $\text{Si}_3\text{-Si}_8$ ва гидрогенланган кичик кластерлар учун аниқланган геометрик структуралар, атомлараро масофалар ва боғланиш энергиялари қийматлари мувозанат ҳолати атомлараро масофалари ва боғланиш энергиялари бўйича натижалари етакчи хорижий илмий журналларда (Journal of Applied and Computational Mathematics, 2017; Journal of Computational nanotechnology, 2016; International Journal of Scientific Research in Science and Technology (IJSRST), 2016; Journal of Modeling and Numerical Simulation of Material Science, 2016; Journal of Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematica, 2016) кучли яқинлашиш усулларининг қўлланиш соҳасини жиддий тарзда аниқлаштириб олишда фойдаланилган. Илмий натижаларнинг қўлланилиши кремний кичик кластерларининг структура-энергетик характеристикаларини аниқлаш имконини берган;

асосида тўртта, бешта ва етти атом ётган кластерлар оптимизациядан кейинги ўсиш жараёнида ичи ковак тузилишни сақлаб қолмаслиги, гексагонал асосли кластерларда эса ичи ковак тузилишли кремний

кластерларининг барқарор ўсишига доир аниқланган ҳолатлар ва сиртдаги орбиталларни водород билан пассивация қилиш, сиртни реконструкция қилиш Si_{29} ва Si_{38} кремний кластерларида геометрик ўлчамлар ҳамда электрон структураларни мос равишда 0,71–1,09 нм оралиғида, тақиқланган зона кенглигини эса 1,02–2,85 эВ оралиғида ўзгартириши ОТ-Ф2-77 рақамли «Яримўтказгичли асбоблар ишочилигини структуранинг ички нуқсонларини ҳисобга олган ҳолда моделлаштириш асосида башорат қилиш усулларини такомиллаштириш» (2017–2021) фундаментал лойиҳасида яримўтказгичнинг сиртости қатламларида жойлашадиган беқарор нуқтавий нуқсонлар физик механизмларини аниқлашда фойдаланилган (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2019 йил 15 июндаги 89-03-2496-сон маълумотномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши яримўтказгичли тузилмалардаги фаркланиш чегараси ва беқарор нуқтавий нуқсонларда флуктуацияларни аниқлаш имконини берган;

$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ кластер ичидаги вакансия барқарор эканлиги ва кластерларнинг дастлабки конфигурациясини сақлаган ҳолда барқарор VN_4 комплекс шаклланишига олиб келиши, ичида вакансияси бўлган кластерларда водород атомлари сони 4 тагача ошириб борилганда тақиқланган зона кенглигининг 0,98 эВ гача ошиб бориши, водород атомларидан бири уч марказли Si-H-Si боғ ҳосил қилиши ФА-Ф4-Ф061 рақамли «Наноўлчамли кремний структураларини олишни ион-плазма технологиясини ишлаб чиқиш» (2015–2017) лойиҳасида олинаётган кремний нанозарраларнинг хусусиятлари ва структураларини таҳлил қилишда фойдаланилган (Ўзбекистон Фанлар академиясининг 2019 йилнинг 10 июндаги 2/1255-1661-сон хати). Илмий натижаларнинг қўлланилиши барқарор наноўлчамли кремний структураларни аниқлаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Мазкур тадқиқот натижалари 6 та халқаро ва 3 та республика илмий-амалий анжуманларда муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича жами 18 та илмий иш нашр этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 7 та мақола, жумладан, 4 таси республика ва 3 таси хорижий журналларда нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, илова ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 121 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Диссертациянинг «**Моделлаштирилган кремний нанозарраларининг тузилиши ва электрон хусусияти**» деб номланган **кириш** қисмида ўтказилган тадқиқотларнинг долзарблиги ва зарурати асосланган. Тадқиқотларнинг Республикамизда фан ва технологияларни ривожининг

асосий устивор йўналишлар билан боғланиши кўрсатиб берилган. Муаммонинг ўрганилганлик даражаси муҳокама қилинган, мақсад ва вазибалар шакллантирилган, объектлар танланган, тадқиқотларнинг предмети аниқланган ва тадқиқот усуллари тавсифлаб берилган. Ишнинг илмий янгилиги баён қилинган, олинган натижаларнинг ишончилиги асослаб берилган. Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти очиб берилган. Диссертация ишининг апробацияси ҳамда ишнинг ҳажми ва тузилиши ҳақида қисқа маълумотлар келтирилди.

Диссертациянинг «**Нанотизимларни компьютерда моделлаштириш усуллари**» деб номланган биринчи бобида наноўлчамли тизимларни компьютерда моделлаштириш усуллари тавсифланган адабиётлар шарҳланган ва бу усулларнинг асосий мазмуни атрофлича таҳлил қилинган. Кучли боғланиш усуллари оиласининг стандарт турларига умумий тавсиф берилган, уларнинг қўлланиш чегаралари ва камчиликлари кўрсатиб берилган ҳамда доктор З.М.Ҳакимов таклиф қилган ноанъанавий кучли боғланиш усули (НКБУ) доирасида бу камчиликларни бартараф қилиш ва муаммони ҳал қилишнинг йўллари таҳлил қилинган.

Ноанъанавий кучли боғланиш усулининг бошқа яримэмпирик усуллардан афзаллик жиҳатлари ва стандарт кучли боғланиш усули (КБУ) да ҳисоблашларни бажариб бўлмайдиган зарядланган тизимлар, наноструктуралар кабилар учун НКБУ ни ривожлантириш имкониятлари очиб берилган.

НКБУ да ўзаро таъсирлашаётган атомлар тизимининг тўлиқ энергияси, изоляцияланган атомлар тизимидан фарқли равишда, қуйидаги кўринишда берилади

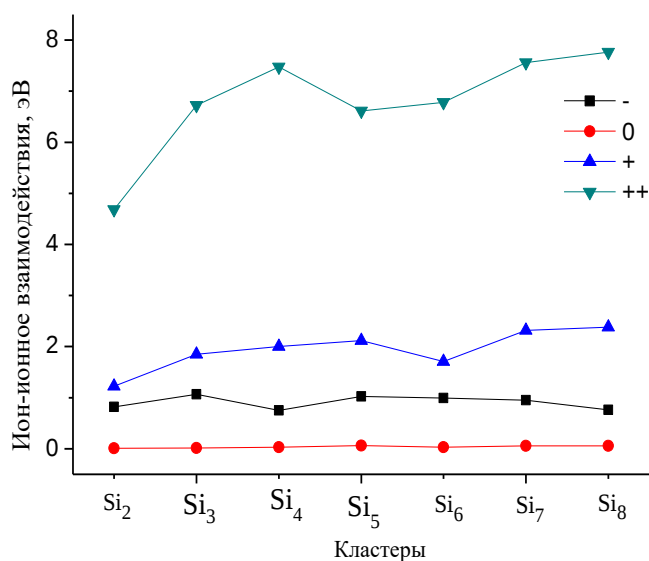
$$E_{tot} = \sum_{\mu} \sum_{\nu > \mu} \frac{Z_{\mu}^{scr}(R_{\mu\nu}) Z_{\nu}^{scr}(R_{\mu\nu})}{R_{\mu\nu}} + \sum_{\mu} \sum_{\nu > \mu} \frac{Q_{\mu}(R_{\mu\nu}) Q_{\nu}(R_{\mu\nu})}{R_{\mu\nu}} + \sum_{\mu} \sum_{\nu > \mu} \sum_i \sum_j P_{\mu i, \nu j} H_{\mu i, \nu j} + \sum_{\mu} (E_{\mu} - E_{\mu}^0), \quad (1)$$

бу ерда μ ва ν ядролар, i ва j – атом орбиталлари (АО); $Z_{\nu}^{scr}(R_{\mu\nu})$ ва $Q_{\mu}(R_{\mu\nu})$ – нейтрал атомлардаги экранланган ядроларнинг зарядлари ва нуқтавий бўлмаган ионларнинг зарядлари; $R_{\mu\nu}$ – атомлараро масофалар; H ва P – гамильтонианнинг ва тизимда электронлар зичлиги (боғланиш тартиблари) нинг матрицалари; E_{μ}^0 ва E_{μ} – мос тарзда, ўзаро таъсирлашаётган ва изоляцияланган индивидуал атом (ион) ларнинг тўлиқ энергиялари; (1) даги 1-ҳад – нейтрал атомларнинг ўзаро итаришиш энергиялари, 2-ҳад – ионлараро ўзаро таъсирлашиш умумий энергияси, 3- ҳад – кимёвий боғланиш энергияси, 4-ҳад – атомлар энергияси.

Бундан ташқари НКБУнинг молекуляр динамика усули билан комбинацияда ишлатилиши сабабли электрон структураларни ҳисоблаш

жуда самарали бўлади ва бу ерда жуда мураккаб интегралларни ҳисоблаш ўрнига мослаштириш параметрларини киритиш йўли билан, ҳисоблашларнинг квант кимёвий характери ни сақлаган ҳолда ҳисоблашларга сарфланадиган машина вақтини жиддий равишда камайитириш мумкин.

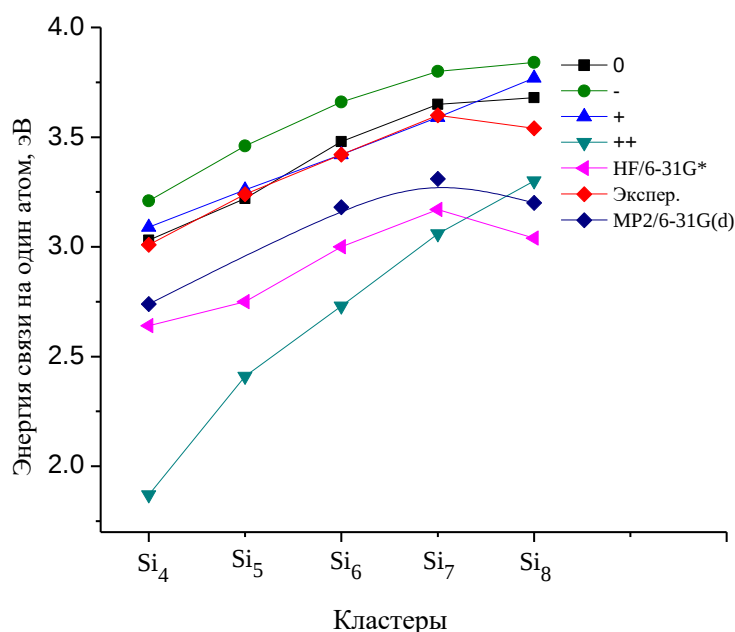
Диссертациянинг «Наноўлчамли кремний кластерларини моделлаштириш» деб номланган иккинчи бобида кремний $\text{Si}_2\text{-Si}_8$ соф кластерларининг структура ва энергетика параметрлари нейтрал, мусбат, манфий ва икки карра мусбат зарядланган ҳолатларда ҳамда квази-бир ўлчамли ичи ковак $\text{Si}_{10}\text{-Si}_{36}$ кластерларнинг барқарор конфигурациялари назарий тадқиқ қилинган. Ҳар бир кластер учун зарядланган ҳолатларда бир нечтадан структуралар ҳисобланди, уларнинг энг барқарор конфигурациялари топилди. Ҳамма $\text{Si}_3\text{-Si}_8$ кластерлар учун ёпиқ учбурчакли тузилиш ва унинг асосидаги фазовий конфигурациялар характерлидир. Шунини таъкидлаш керакки, барча кластерларда нейтрал ва манфий зарядланган ҳолатлар бир-бирига ўхшаш тузилишга эга, бу уларнинг атомлари орасидаги Маделунг ўзаро таъсирининг қиймати бир-бирига яқинлиги билан изоҳланади. 1-расмда кремний кластерлари ион-ион ўзаро таъсирлашиш энергияси мусбат зарядланган ҳолларда манфий зарядланган ҳолларга нисбатан катталиги кўринади.



1-расм. Кластерларда ионлараро ўзаро таъсир энергиясининг уларнинг ўлчамлари ва заряд ҳолатига боғлиқлиги

Тадқиқотда амалга оширилган моделлаштириш натижаларига кўра кластерда битта атомга тўғри келадиган боғланиш энергиясининг атомлар сонига боғланиши нейтрал ва мусбат зарядланган ҳолатлар учун (2-расм) тажриба натижалари билан энг кўп мос келади. Кичик $\text{Si}_2\text{-Si}_5$ кластерларда $U(-)$ Андерсон ҳодисаси, яъни нейтрал ҳолатнинг мусбат ва манфий зарядланган ҳолатларга нисбатан беқарорроқ бўлиши кузатилади. Афтидан, бу структураларда электронларнинг узилиб чиқиб кетиши ва бириктириб

олиниши жуфтлик ҳолатда юз беради ва кластер заряд ҳолати мусбатдан манфийга (нейтрални четлаб ўтиб) (ва аксинча) тўғридан-тўғри ўтиб кетади.



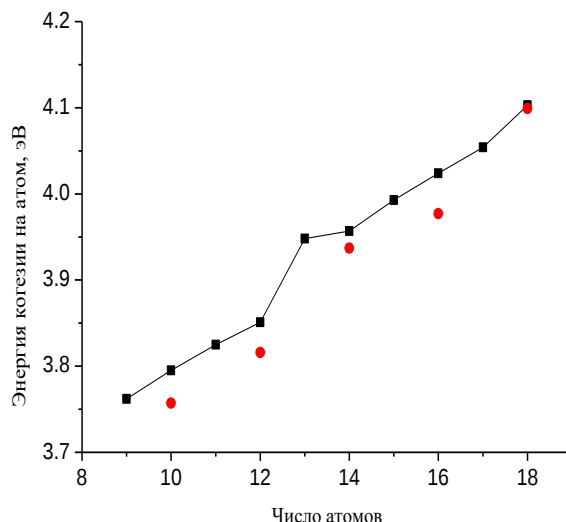
2-расм. Кичик кластерларда битта атомга мос келадиган боғланиш энергиясининг уларнинг ўлчамлари ва заряд ҳолатларига боғлиқлиги

Ичи ковак кластерлар учун учта структура қараб чиқилди: асосдаги атомлар ён ёқлари ромблардан иборат структуралар; асослар бир-бирига нисбатан ён ёқлари мунтазам кўпбурчакдан иборат структуралар; иккинчи тип асосида олинган, лекин бирор томондан тартибсизланган структуралар.

Кремний тузилмалари 10 тадан 16 тагача атомли ўлчамлар соҳасида энергетик жиҳатдан симметриясини йўқотган, қайсидир томондан тартибсизланган, лекин ичи коваклигини сақлаган структуралар энг барқарор бўлади. Уларнинг когезия энергияларини, илгари тадқиқ қилинган [Tereshchuk P.L., Khakimov Z.M., Umarova F.T., Swihart M.T. Growth Patterns of Silicon Clusters: Quasi-one-dimensional Clusters versus Diamond-like Clusters. //Phys. Rev. B. 2007, V76. C.125418-7] квази-бирўлчамли, марказий ўқи бўйича ички атомлар жойлашган (3-расм) кластерларнинг когезия энергиялари билан солиштирса бўлади. Гексагонал асосли кластерлар ўлчамлари ортиб борган сари ёки чўзиқ ичи ковак ёки фуллеренсимон тузилишни сақлаб туради. Ва улар кремний нано-ипларини синтез қилишда қурилиш блоклари вазифасини бажариши мумкин.

Ён ёқларидаги учқарра координацияланган атомларини водород билан пассивация қилиш гексагонал асосли чўзиқ кластерларнинг (36 атомгача) ковакли тузилишини барқарорлаштиради. Фуллеренсимон кластер тузилиш-

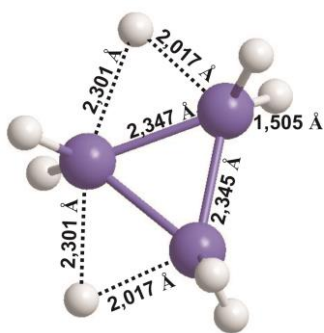
ларини барқарорлаштиришга кластернинг марказий ўқи бўйича кремний атомларни қўшиш орқали эришилади.



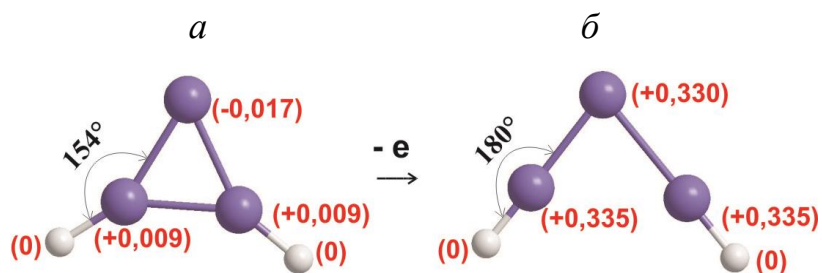
3-расм. Ковакли, бирор томондан тартибсизланган учинчи тип кластерлар (доиралар) ва борлиги тахмин қилинган, ички атомлар занжирига эга бўлган кластерлар (қора квадратлар) учун битта атомга тўғри келадиган когезия энергияларининг атомлар сонига боғланиши

Диссертациянинг «Кремний нано-зарраларининг тузилиши ва барқарорлигига сирт ҳолатларининг таъсири» деб номланган учинчи боби кремний нано-зарраларининг тузилиши ва барқарорлигига улар сиртидаги тўйинмаган боғларни пассивация қилиш усуллариининг таъсирини ўрганишга бағишланган. Водород кремний нано-зарраларини олишнинг бир қатор технологик жараёнларида, масалан, SiH_4 силандан термик усулда олишда қўлланади ва нанокристал кремний структурасининг шаклланишида муҳим роль ўйнайди. Кремнийнинг аввал кўриб чиқилган соф кичик кластерларининг структурасига водороднинг таъсирини тадқиқ қилишда кичик кремний кластерларини турли сондаги водород атомлари билан изчил тўйинтириб бориш йўли билан гидрогенланган кластерлар ҳосил қилинди. Олинган натижалар гидрогенланган структуралар, таркибида кремний атомлари бир хил бўлса ҳам, мос соф кластерлар структураларидан жиддий тарзда фарқ қилишини кўрсатди. Соф кластерлардан фарқли ўларок, гидрогенланган кластерлар учун очик структуралар характерлидир (4- ва 5-расм). Кўпчилик кластерларда нейтрал ва икки қарра мусбат зарядланган структуралар бир хил геометрияга эга экан.

Кластер ўлчамларининг ортиб бориши билан қисман тармоқланган тузилишдан ихчам циклик тузилишга ўтиш рўй беради. Аини пайтда олмооссимон геометрияга хос тетраэдрик боғланишлар кузатила бошлайди ва катта кластерларда шундай боғланишлар сақланади.



**4-расм. Si_3H_8
кластер
структураси**



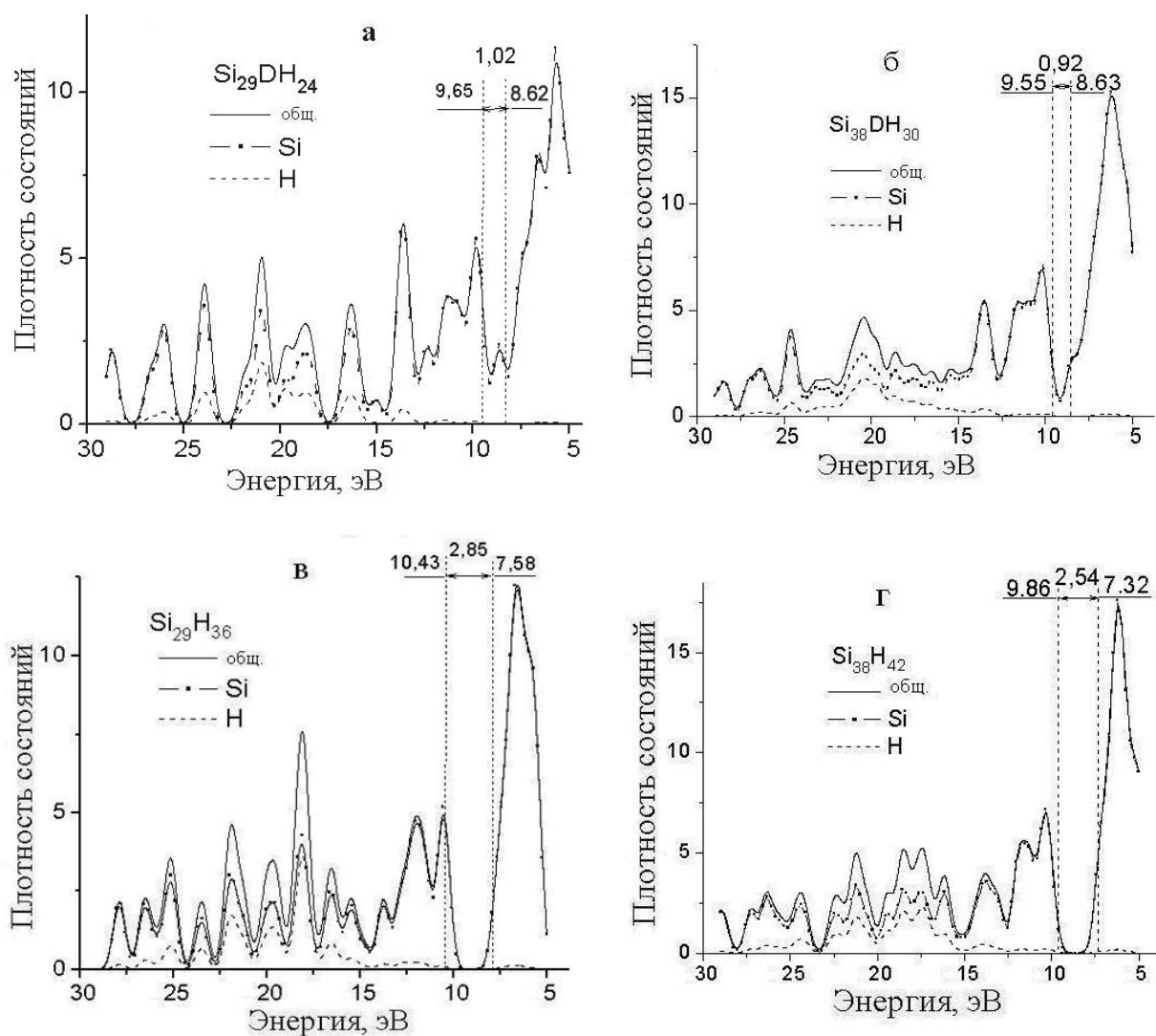
**5-расм. Si_3H_2 (a) ва $(\text{Si}_3\text{H}_2)^+$ (б) кластерларнинг
барқарор структуралари**

Шундан кейин кремний нано-зарраларининг тузилиш барқарорлигига ва энергетик характеристикаларига сиртни реконструкция қилиш ва водород атомларининг таъсири тадқиқ қилинди. Бу ерда сиртларини димеризация қилиш натижасида олмооссимон Si_{29} , Si_{38} кластерлар структураларининг оптимизацияси қараб чиқилди. Димеризация натижаларини таҳлил қилиш олмооссимон кластерларнинг оптималланган структуралари сиртни дастлабки реконструкция қилиш моделига сезгир бўлишини кўрсатди. Сиртдаги атомлари димерланган кластерлар оптимизациядан кейин ҳам ўз структурасини сақлаб қолади. Бошқа ҳолатларда (кластер сиртининг макроўлчамли кремнийда тетраэдрик тугунлараро ҳолатга мос келадиган позициясига қўшимча атомлар киритиш, ёки зўриқиш эҳтимоли бор бўлган конфигурацияларда бирнечта сирт атомларини олиб ташлаш йўли билан сиртни текислаш) кластерларнинг оптималланган геометриялари олмооссимон ядрога эга бўлмаган структураларни беради. Кластерлар сиртларини ҳар хил йўллар билан реконструкция қилиб моделлаштириш шуни кўрсатдики, афтидан, катта олмооссимон кластерларнинг сиртлари олмооссимон структурали ядрога маҳкамланган пентагонал фрагментлардан иборат бўлиши энергетик жиҳатдан энг фойдали бўлар экан. Сиртни гидрогенлаш наноматериал электрон ва энергетик зоналари структураларининг ўзгаришига, таъқиқланган зонада фаол локал сатҳларнинг пассивациясига ва электрофизик ва оптоэлектрон хусусиятларининг ўзгаришига олиб келади.

Сиртдаги орбиталларни пассивация қилиш кластерларнинг геометрик структураларини ҳам, электрон структураларини ҳам ўзгартиради - атомлардаги зарядлар тақсимооти, энергетик ҳолатлар зичлиги ва таъқиқланган зона кенглиги ўзгаради. 6-расмдан кўринадики, водород билан пассивацияланган $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ кластерда таъқиқланган зона кенглиги 2.7–3.0 эВ ни, $\text{Si}_{38}\text{H}_{42}$ да эса - 2.54 эВ ни ташкил этади. Сирти реконструкцияланган, тўлиқ пассивацияланган кластерларда таъқиқланган зонаси кенглиги бироз камроқ: $\text{Si}_{29}\text{DH}_{24}$ учун 1.02 эВ ва $\text{Si}_{38}\text{DH}_{30}$ учун 0.92 эВ.

Шундай қилиб, олмооссимон ва сирти реконструкцияланган (димерланган) кластерларнинг оптималланган структуралари сиртдаги тўйинмаган орбиталларни водород билан пассивацияланган ҳолда

хисобланди ва Si ва H атомларнинг сонларига боғлиқ тарзда моделлари тузилди.



6-расм. $\text{Si}_{29}\text{DH}_{24}$ (a), $\text{Si}_{38}\text{DH}_{30}$ (б), $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ (в), $\text{Si}_{38}\text{H}_{42}$ (г) кластерларда энергетик ҳолатлар зичлигининг тақсимооти. Узуликсиз чизик билан умумий тақсимот, штрих чизик билан Si атомлари учун, пунктир чизик билан эса H атомлари учун тақсимотлар кўрсатилган. Вертикал пунктир чизиклар тирқиш чегараларини кўрсатади

Олинган натижалар сиртдаги орбиталларни пассивация қилиш кластерларнинг ҳам геометрик, ҳам электрон структураларини ўзгартиришини, атомларда зарядлар тақсимотининг, энергетик ҳолатлар зичлигининг ва таъқиқланган ҳолат тирқиш кенглигининг ўзгаришига олиб келишини кўрсатди.

Диссертациянинг «Кремний нано-зарраларида нуқсонли ҳолатларни тадқиқ қилиш» деб номланган тўртинчи бобида нано-заррадаги вакансия, водород, углерод каби нуқтавий нуқсонлар ҳамда уларнинг структура барқарорлиги ва энергетик характеристикаларга таъсири ўрганилган. Бажарилган назарий ҳисоблашлар асосида вакансия соф Si_{29} кластерда

бекарор, гидрогенланган $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ кластерда барқарор бўлиши ва унинг марказининг симметриясини T_d дан C_{3v} га ўзгартириши кўрсатиб берилди. Гидрогенланган $\text{Si}_{38}\text{H}_{30}$ кластерларда энергетик жиҳатдан вакансияли кластер афзалликка эга. Сирти гидрогенланган $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ кластерда Н водород кластер ичидаги гексагонал тугунлараро ҳолат ва тугунлараро марказий нуқта ўртасида барқарор жойлашади. Катта ҳажмли кремнийдаги каби, нанокластерларда ҳам вакансиянинг ҳосил бўлиши тақиқланган ҳолат тирқиш кенглигига таъсир қилади. Вакансия атрофига Н атомларини кетма-кет киритиб борилса, тирқиш кенглиги ортиб боради. Учинчи Н атоми киритилганда тақиқланган ҳолат тирқиш кенглиги кескин ортади (1-жадвал). Энг юқоридаги электрон банд қилган молекуляр орбитал (ЮБМО) билан энг қуйидаги бўш молекуляр орбитал энергиялари қийматларининг водород атомлари миқдорига боғлиқлиги графиги (7-расм) дан кўринадики, учинчи Н атоми киритилганда ЮБМО-ҚБМО тирқиш кенглиги кескин ортади, кейин барқарорлашади ва доимий қийматга эришади.

1-жадвал

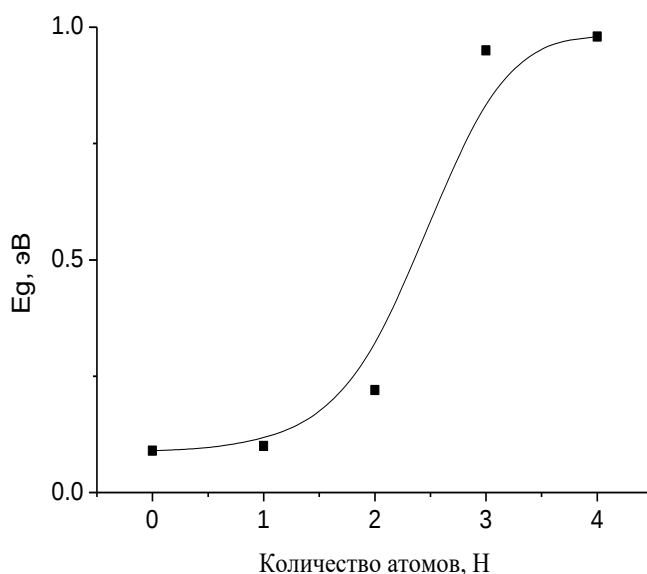
Вакансияси турли даражада гидрогенланган кластерлар учун ЮБМО, ҚБМО ва улар орасидаги тақиқланган ҳолат энергиялари

Кластер	$E_{\text{НОМО}}$, эВ	$E_{\text{ЛУМО}}$, эВ	E_g , эВ
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$	9.65	8.62	1.02
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24_V}$	9.14	9.05	0.09
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24_VH}$	8.99	8.90	0.10
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24_VH2}$	9.18	8.96	0.22
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24_VH3}$	9.47	8.52	0.95
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24_VH4}$	9.54	8.56	0.98

Кремний кластерларидаги вакансияга водород атомларини киритиш кластер конфигурациясига сезиларли даражада таъсир кўрсатмайди. Агар вакансиянинг узилган боғлари водород атомлари билан етарлича тўйинмаган бўлса, водород атомларидан бири уч марказли Si-H-Si боғ, қолганлари эса бошқа кремний атомлари билан мустаҳкам ковалент боғ ҳосил қилади. Учинчи Н атоми киритилганда n-Si нинг тақиқланган зонасидан локал сатҳларни тўлиқ кетказиш ва тирқишнинг кенгайиши вакансиянинг 1-қўшнилари бўлган Si атомларнинг боғланмаган узилган орбиталлари йўқлиги билан тушунтирилади.

Углерод атомининг кремний кластери билан боғланиш энергияси сирти димерланган Si_{29} кластерда энг катта қийматга эга бўлади. Ҳисоблаш натижалари 2-жадвалда келтирилган, ундан углерод атомининг кремний кластери билан боғланиш энергияси сиртида узилган бўш боғлари бўлган соф Si_{29} кластерда энг кучли намоён бўлишини кўриш мумкин, бу эса унинг кучли фаоллигига боғлиқ. Бу яна шу билан ҳам тасдиқланадики, манфий зарядланган кластер углерод атоми билан кучлироқ боғланади. Углерод

киритма атоми сабабли пайдо бўлган локал сатҳлар зонанинг чегараларига, яъни ЮБМО ва ҚБМОга кам таъсир қилади.



7-расм. Марказида вакансия бўлган гидрогенлаган $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ кластерда ЮБМО-ҚБМО энергияси ўзгаришининг киритилаётган водород атомлари сонига боғланиши

2-жадвал

Кремний нано-кластеридаги тугунлар орасида жойлашган углерод атомининг энегетик параметрлари

	Углероднинг кластер билан боғланиш энергияси, эВ	$E_{\text{ВЗМО}}$	$E_{\text{НСМО}}$	E_g
$\text{Si}_{29}\text{C}(-)$	12.59	8.61	8.38	0.23
$\text{Si}_{29}\text{C}(+)$	12.29	8.26	8.25	0.01
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}\text{C}(-)$	7.51	9.35	9.06	0.29
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}\text{C}(+)$	7.85	8.86	8.37	0.49
$\text{Si}_{29}\text{H}_{36}\text{C}(-)$	6.61	10.39	8.96	1.43
$\text{Si}_{29}\text{H}_{36}\text{C}(+)$	6.78	9.53	9.04	0.49

Бу биринчидан, тугунлараро жойлашган киритмалар одатда таъқиқланган зонага саёз сатхлар бериши билан, иккинчидан, углерод атоми энергетик характеристикалари ва валент холатига кўра кремнийдан кам фарк қилиши билан боғлиқ. Шунинг учун, бундай киритма тугунда кремний атоми ўрнига жойлашиб қолганда ҳам чуқур локал сатхлар бермайди. Углерод манфий зарядланган холда кристал панжара билан кучлироқ боғланади ва нанокремнийнинг таъқиқланган зонасида саёз сатхлар беради.

Бу, биринчидан, тугунлараро жойлашган киритмалар, одатда, тақиқланган зонага саёз сатхлар бериши; иккинчидан, углерод атоми энергетик характеристикалари ва валент ҳолатига кўра кремнийдан кам фарк қилиши билан боғлиқ. Шунинг учун бундай киритма тугунда кремний атоми ўрнига жойлашиб қолганда ҳам чуқур локал сатхлар бермайди. Углерод манфий зарядланган ҳолда кристалл панжара билан кучлироқ боғланади ва нанокремний тақиқланган зонасида саёз сатхлар беради.

3-жадвал

Тугунлар орасида жойлашган углероднинг кремний нанокластерларида водород билан боғланишида энергетик параметрлар

	Нуқсон комплексининг боғланиш энергияси, эВ	$E_{\text{ВЗМО}}$	$E_{\text{НСМО}}$	E_g
$\text{Si}_{29}\text{:CH}$	12.34	8.29	8.19	0.10
$\text{Si}_{29}\text{:CH}(+)$	12.58	8.04	7.93	0.11
$\text{Si}_{29}\text{:CH}(-)$	12.15	8.57	8.47	0.10
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}\text{:CH}$	7.53	8.67	8.15	0.52
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}\text{:CH}(+)$	7.68	8.06	7.11	0.95
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}\text{:CH}(-)$	7.45	9.31	9.22	0.09

Углерод-водород нуқсон комплексининг кремний кластери билан боғланиш энергияси гидрогенланган кластерларда камаяди. 3-жадвалда углерод-водород нуқсон комплекси кремний кластери билан боғланиш энергиясининг гидрогенланган кластерларда камайиши кўрсатилган. Кластерлардаги нуқсоннинг ҳосил қилинган мусбат зарядланган ва нейтрал ҳолатлари таъқиқланган зонада чуқур локал сатхлар беради, манфий зарядланганда эса валент зонадан юқорида саёз сатх пайдо бўлади.

ХУЛОСА

«Моделлаштирилган кремний нанозарраларининг тузилиши ва электрон хусусияти» мавзусидаги диссертация ишининг натижалари асосида қуйидаги хулосалар келтирилади:

1. Кремний нанокластерларини моделлаштиришнинг турли назарий усулларини ўрганиб чиқиш асосида НКБУ усули ковалент боғланишли нано-зарралар учун, яъни нано-зарраларнинг геометрик структуралари, боғланиш энергиялари, ионланиш потенциаллари, электронга тўйиниш энергиялари ва таъқиқланган тирқиш кенглигини ҳисоблашлар ва нано-зарралар шаклланишининг компьютердаги моделларини тузишга самарали қўлланиш мумкинлиги кўрсатиб берилди.

2. Соф $\text{Si}_3\text{-Si}_8$ кремний кластерлари учун учбурчакли структуралар ва улар асосидаги фазовий конфигурациялар характерли экани аниқланди. Гидрогенланган кичик кластерлар учун тармоқланган структура характерли бўлиб, у атомлар сони ортиб бориши билан олмоССИМОН геометрия учун характерли бўлган тетраэдрик боғланишли циклик шаклга ўтади.
3. Кичик $\text{Si}_2\text{-Si}_5$ кластерларда U(-) Андерсон ҳодисаси, яъни нейтрал структуранинг манфий ва мусбат зарядланган ҳолатларга нисбатан камроқ барқарор бўлиши кўрсатиб берилди.
4. Кремнийнинг гексагонал асосли ичи ковак кластерлари барқарор ўсиб бориши кўрсатиб берилди. Ён ёқ атомларининг тўйинмаган боғларини пассивация қилиш, шунингдек марказий ўқ бўйлаб қўшимча атомларни киритиш барқарор ичи ковак кластер ўлчамларини катталаштиради.
5. Кластерлар тузилишининг сирт ҳолатига сезгирлиги аниқланди, сирти димерланган кластерларнинг структура ва электрон хоссалари гидрогенланган кластерларнинг хоссаларидан фарқ қилиши кўрсатиб берилди. Бу кластерлар сирт ҳолатларининг димерланган кластерлар геометрияларини оптималлаш ва электрон структура ўзгаришларига сезгирлиги билан изоҳланади.
6. Нейтрал ва мусбат зарядланган кластерларда водороднинг кластер ичида тугунлараро гексагонал нуқта билан боғлар орасидаги нуқта ўртасида барқарор жойлашиши кўрсатиб берилди.
7. Соф Si_{29} кластерда вакансия беқарор, гидрогенланган $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ кластерда эса барқарор бўлиши топилди. Вакансия жойлашган соҳада узилган боғларни тўлиқ тўйинтириш кластер конфигурациясига унчалик таъсир кўрсатмаслиги, айна пайтда VH_4 барқарор комплекс шаклланишига олиб келиши аниқланди. Н атомлари сонининг ортиб бориши билан бирга кластер таъқиқланган ҳолат тирқиши кенглигининг ортиб бориши кузатилади. Вакансиянинг узилган боғларини Н атомлари билан етарлича тўйинтирилмаса, Н атомларидан бири кўприксимон учмарказли Si-H-Si боғ ҳосил қилади, қолганлари эса кремний атомлари билан ковалент боғлар ҳосил қилиб маҳкам боғланади.
8. Кремний кластерларида углерод атомининг турлича зарядланган тугунлараро ҳолатларининг моделлари ҳисобланди. Углерод атоми тугунлараро позицияда жойлашиб, иккита кремний атоми билан кўприксимон боғ ҳосил қилиши ва соф Si_{29} нинг таъқиқланган зонасида саёз сатҳлар бериши аниқланди.
9. Таркибида углерод бўлган кластерларга водородни киритиш углерод-водород нуқсон комплекси шаклланишига олиб келиши, унинг боғланиш энергияси гидрогенланган кластерларда камайиши, таъқиқланган тирқиш эса нуқсоннинг заряд ҳолатига боғлиқ равишда ўзгариши ва бунда валент зона устида ҳам чуқур, ҳам саёз сатҳлар пайдо бўлиши кўрсатиб берилди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.27.06.2017.FM/T.33.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
АСТРОНОМИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ, НАЦИОНАЛЬНОМ
УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА**

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

НОРМУРОВ АСРОР БАЗАРОВИЧ

**СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА
МОДЕЛИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

Ташкент – 2019

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № B2018.4.PhD/FM294

Диссертация выполнена в Институте ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.inp.uz) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziyo.net).

Научный руководитель:	Ташметов Маннаб Юсупович доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты:	Джуманов Сафарали доктор физико-математических наук, профессор Гулямов Гафур доктор физико-математических наук, профессор
Ведущая организация:	Ташкентский университет информационных технологий имени Мухаммада аль-Хоразми

Защита диссертации состоится «___» _____ 2019 года в ___ часов на заседании Научного совета DSc.27.06.2017.FM/T.33.01 при Институте ядерной физики, Астрономическом институте, Национальном университете Узбекистана (Адрес: 100174, г. Ташкент, пос. Улугбек, ИЯФ. Тел.: (+99871) 289-31-18; факс: (+99871) 289-36-65; e-mail: info@inp.uz).

Диссертация зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре Института ядерной физики (регистрационный номер ___), с диссертацией можно ознакомиться в ИРЦ (Адрес: 100214, г. Ташкент, поселок Улугбек, ИЯФ. Тел. (+99871) 289-31-19).

Автореферат диссертации разослан «___» _____ 2019 г.
(протокол рассылки No _____ от _____ 2019 г.).

И. Нуритдинов
вр.и.о.председателя Научного совета по присуждению
ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

Э.М. Турсунов
ученый секретарь Научного совета по присуждению
ученых степеней, д.ф.-м.н.,
старший научный сотрудник

И. Нуритдинов
председатель научного семинара
при Научном совете по присуждению
ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время в мире изучение свойств наночастиц, сформированных в различных полупроводниковых материалах и их соединениях, является одним из приоритетных направлений развития материаловедения и современной твердотельной наноэлектроники. Проведенные теоретические и экспериментальные исследования и компьютерное моделирование процессов формирования наноструктур в полупроводниковых кристаллах охватывают широкий круг задач, начиная от технологических способов получения наночастиц, изучения физических процессов, протекающих при их образовании, стабильности их кристаллической структуры до получения нанокристаллов с новыми свойствами и разработки на их основе изделий и приборов нового поколения. По изучению параметров и свойств полупроводниковых наночастиц опубликован ряд обзорных статей в различных международных научных изданиях. Эти работы базируются в основном на полученных экспериментальных результатах по наночастицам и наноструктурам, в то же время теоретические работы по расчету параметров наносистем с использованием методов компьютерного моделирования могут предсказать многие их свойства.

На сегодняшний день исследования, проводимые в области компьютерного моделирования, являются одним из сравнительно новых и актуальных направлений изучения нанокристаллов и позволяют прогнозировать и выявлять оптимальные параметры кристаллической структуры и электронных свойств наночастиц. Монокристаллический кремний является одним из основных материалов современной полупроводниковой микро- и наноэлектроники. Если учесть возможность образования в базовом материале малых кластеров с ограниченными размерами, то эти кластер-содержащие системы представляют собой новый тип материалов, которые проявляют свойства, наблюдаемые как в молекулярной и атомной физике, так и в физике конденсированного состояния. В связи с этим изучение процессов образования кластеров, выявление их структурных и энергетических параметров и электронных свойств методами компьютерного моделирования является одним из актуальных направлений наноматериаловедения.

В нашей республике уделяется большое внимание на изучение фундаментальных основ получения материалов, содержащих наноструктур. Формирование нанокристаллов в матрице исследуемых материалов позволят изготовить на их основе различные изделия для оптоэлектроники, фотоники и полупроводниковой электроники, а также проведению фундаментальных исследований в этом направлении на мировом уровне. Полученные фундаментальные результаты по наночастицам кремния имеют большое значение и могут стать базой для развития науки в нашей стране и её

применения, отраженных в Стратегии¹ действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017-2021 гг.

Исследования, проведенные в данной диссертационной работе, соответствуют задачам, предусмотренным в Указах Президента Республики Узбекистан № УП-4947 от 7 февраля 2017 года «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017–2021 гг.», № УП-4958 от 16 февраля 2017 года «О дальнейшем совершенствовании системы послевузовского образования», в Постановлении Президента Республики Узбекистан № ПП-2789 от 17 февраля 2017 года «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности», а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данном направлении.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Диссертационное исследование проведено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий в Республике Узбекистан: II. “Энергетика, энерго- и ресурсосбережение”.

Степень изученности проблемы. Экспериментальные и теоретические исследования в области малых наночастиц кремния проводятся известными отечественными и зарубежными учеными, в том числе индийскими (К. Рагхавачари), американскими (L.A. Куртис, G. Belomoin, S.E. Douglas, M.T. Swihart), китайскими (J.C. Yang), российскими (А.А. Кузубов), турецкими (M. Durandurdu), японскими (Y. Watanabe) и другими.

Исследованы малые кластеры $\text{Si}_2\text{-Si}_8$, являющиеся зародышевыми состояниями наночастиц, неэмпирическим методом Хартри-Фока с поляризованным базовым набором 6-31G*; проведено моделирование заряженных состояний этих кластеров; показана стабильность малых полых кластеров, содержащих до 20 атомов кремния. Обнаружение люминесцентных свойств в видимой области света малых наночастиц кремния с размером ~ 1 нм позволило принять модель частицы, содержащей 29 атомов. Проблема стабилизации поверхности и ее влияния на свойства кластера породило ряд работ по реконструкции поверхности, путем насыщения ее водородом и другими реагентами. выявили важную роль водорода в росте наночастиц кремния. Однако вопрос окончательной модели поверхности кластера до сих пор не решен и требует дальнейшего развития экспериментальных и теоретических работ. Водород при этом является не только пассиватором поверхности кластера, но и образует самостоятельные дефектные состояния внутри кластера.

Теоретические расчеты энергетических характеристик наночастиц кремния ранее проводились полуэмпирическими и эмпирическими методами, которые давали результаты в основном качественного характера. Тогда как вычислительные затраты методов из первых принципов до сих пор являются

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

достаточно высокими, так что эти методы являются непрактичными для моделирования большинства систем. Разработанный и в дальнейшем развитый узбекскими учеными (А.Ш. Махмудовым, З.М. Хакимовым, Ф.Т. Умаровой и А.П. Мухтаровым) нестандартный метод сильной связи (НМСС) в комбинации с молекулярной динамикой (МД) позволил моделировать кластеры кремния, содержащие до 50 атомов с точностью, сопоставимой с результатами *ab-initio* расчетов.

Дальнейшее развитие и применение НМСС в комбинации с МД для кластеров, содержащих примесные и дефектные состояния, позволит не только систематизировать, углубить и расширить проводимые исследования малых наночастиц кремния, но и повысить применимость подхода компьютерного моделирования для решения трудноустраняемых и материально затратных проблем в экспериментальных работах.

Связь темы диссертационного исследования с тематическими планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационная работа выполнялась в рамках научно-исследовательских проектов Института ядерной физики АН РУз по темам: ФА-Ф2-Ф066+Ф072 «Свойства и структуры полупроводниковых материалов, содержащих низкоразмерные наноконпозиции и наночастицы» (2007 – 2011); Ф2-ФА-Ф121 «Формирование микронеоднородностей и их влияние на фундаментальные свойства нейтронно-легированного кремния при гидрогенизации» (2012–2016); ОТ-Ф2-20 «Низкоразмерные структурные превращения в легированном кремнии при радиационном воздействии и влияние их на свойства монокристалла» (2017–2020).

Целью исследования является создание и оптимизация компьютерной модели кластеров кремния на основе проведенных теоретических расчетов их геометрических и структурных параметров и изучение влияния дефектных состояний на свойства и устойчивость сформированных наночастиц.

Задачи исследования:

компьютерное моделирование малых кластеров $\text{Si}_2\text{-Si}_8$ и гидрогенизированных кластеров $\text{Si}_2\text{H}_4\text{-Si}_8\text{H}_{16}$;

квантовохимическое моделирование наноразмерных идеальных кластеров кремния, содержащих 29 и 38 атомов;

исследование модели поверхности кластера кремния Si_{29} и Si_{38} , реконструкции поверхностной структуры и димеризации атомов на поверхности;

изучение устойчивых конфигураций полых кластеров кремния $\text{Si}_{12}\text{-Si}_{36}$;

исследование влияния пассивации поверхностных атомов кластеров кремния Si_{29} и Si_{38} атомами водорода на их стабильность;

выявление влияния примесей на электронную структуру и стабильность кластеров кремния.

Объектами исследования являются наноразмерные кластеры кремния, содержащие до 38 атомов.

Предметом исследования являются структурные и энергетические параметры и электронные свойства наноразмерных кластеров кремния.

Методы исследования. Для решения поставленных задач использован комбинированный подход нестандартного самосогласованного метода сильной связи с методом молекулярной динамики. Выбор данного метода обусловлен тем, что нестандартный метод сильной связи позволяет с точностью первопринципных методов провести расчеты и моделировать кластеры достаточно больших размеров.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

выявлено, что для чистых кремниевых кластеров типа Si_3 - Si_8 характерны треугольные структуры и пространственные конфигурации на их основе, а для гидрогенизированных малых кластеров наблюдается разветвленная структура с переходом в циклическую форму с характерными для алмазоподобной геометрии тетраэдрическими связями;

показано, что кластеры в основании которых лежат правильные многоугольники, состоящие из четырех, пяти и семи атомов, не сохраняют после оптимизации полую структуру в процессе роста, а в кластерах с гексагональным основанием сохраняется стабильный рост полых кластеров кремния;

впервые установлена чувствительность структуры кластеров к состоянию поверхности и показано, что пассивация водородом поверхностных орбиталей и реконструкция поверхности изменяют геометрические размеры и электронную структуру кремниевых кластеров Si_{29} и Si_{38} в пределах 0.71-1.09 нм, а ширину запрещенной зоны в пределах 1.02-2.85 эВ, соответственно;

установлено, что вакансии в кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ стабильна по сравнению с Si_{29} и полное насыщение оборванных связей в области вакансии водорода приводит к формированию стабильного комплекса VH_4 с сохранением исходной конфигурации кластеров;

показано, что увеличение количества внедренных атомов водорода до 4-х в кластерах кремния, содержащего вакансии, сопровождается возрастанием ширины запрещенной зоны кластера до 0,98 эВ, а один из атомов водорода образует мостиковую трехцентровую связь Si-H-Si , тогда как остальные жестко связываются с образованием ковалентной связи с кремнием;

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

показано, что нестандартный метод сильной связи (НМСС) может быть эффективно использован для изучения ковалентно-связанных наночастиц для расчета геометрической структуры, энергии связи, потенциала ионизации, энергии электронного сродства и ширины запрещенной зоны наноструктур и построения компьютерных моделей их образования;

найден, что в малых Si_2 - Si_5 кластерах наблюдается $U(-)$ Андерсоновский эффект, т.е. неустойчивость нейтральной структуры по сравнению с отрицательно и положительно заряженными состояниями;

показано, что в нейтральном и положительно заряженном кластерах водород стабилизируется внутри кластера в середине между связицентрированной точкой и точкой гексагональной конфигурации.

установлено, что наличие углерода в чистом Si_{29} кластере приводит к образованию мелких энергетических уровней, а внедрение водорода в углеродосодержащие кластеры приводит к формированию дефектного комплекса углерод-водород.

Достоверность результатов исследования обосновывается совпадением результатов расчета размеров и структур наночастиц с литературными данными, применением независимых методов и непротиворечием полученных данных существующим физическим принципам и понятиям.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследования заключается в том, что проведенные квантовохимические исследования необходимы для создания научных основ нанотехнологий, что упрощает и ускоряет создание и реализацию последних.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что полученные результаты расчетов формы, структуры поверхности и точечных дефектов в наноразмерных кластерах кремния методами компьютерного моделирования позволяют прогнозировать устойчивые формы наночастиц кремния, управлять процессом формирования наночастиц и нанонитей кремния, получать допированные нанокристаллические кластеры кремния с необходимыми свойствами для электроники и фотоники.

Внедрение результатов исследования. На основе полученных результатов по исследованию структуры и электронных свойств моделированных наночастиц кремния:

выявленные для чистых кремниевых Si_3 - Si_8 и для гидрогенизированных малых кластеров геометрические структуры, межатомные расстояния и величины энергий связи малых кластеров кремния были использованы зарубежными исследователями (ссылки в международных научных журналах Journal of Applied and Computational Mathematics, 2017; Journal of Computational nanotechnology, 2016; International Journal of Scientific Research in Science and Technology (IJSRST), 2016; Journal of Modeling and Numerical Simulation of Material Science, 2016; Journal of Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematica, 2016) для сравнения результатов по равновесным межатомным расстояниям и величинам энергий связи. Использование результатов позволило существенно уточнить область применения методов, основанных на приближении сильной связи, и определить структурно-энергетические характеристики малых кластеров кремния;

установленные положения о том, что кластеры в основании которых лежат правильные многоугольники, состоящие из четырех, пяти и семи атомов, не сохраняют после оптимизации полную структуру в процессе роста, а в кластерах с гексагональным основанием сохраняется стабильный рост

полых кластеров кремния, а также что пассивация водородом поверхностных орбиталей и реконструкция поверхности изменяют геометрические размеры и электронную структуру кремниевых кластеров Si_{29} и Si_{38} в пределах 0.71-1.09 нм, а ширину запрещенной зоны в пределах 1.02-2.85 эВ, соответственно, были использованы в рамках фундаментального проекта ОТ-Ф2-77 «Совершенствование методов прогнозирования надежности полупроводниковых приборов на основе моделирования с учетом внутренних дефектов структуры» (2017-2021) при установлении физических механизмов нестабильных точечных дефектов, находящихся в приповерхностном слое полупроводника (справка Министерства высшего и среднего специального образования Республики Узбекистан № 89-03-2496 от 15 июня 2019 года). Использование этих результатов позволило выявить флуктуации поверхностных зарядов на границе раздела и нестабильных точечных дефектов в полупроводниковых структурах;

установленные результаты о стабильности вакансии в кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ и формировании стабильного комплекса VN_4 с сохранением исходной конфигурации кластеров; об увеличении количества внедренных атомов водорода до 4-х в кластерах кремния, содержащего вакансии, сопровождающееся возрастанием ширины запрещенной зоны кластера до 0,98 эВ, об образовании одним из атомов водорода мостиковой трехцентровой связи Si-H-Si, были использованы в рамках научно-исследовательского проекта ФА-Ф4-Ф061 «Разработка ионно-плазменной технологии получения кремния с наноразмерными структурами» (2015-2017) при анализе полученных наночастиц для понимания их свойств и структуры (Письмо Академии наук Республики Узбекистан № 2/1255-1661 от 10 июня 2019 г.). Использование этих результатов позволило получить стабильные структуры наночастиц кремния.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 6 международных и 3 Республиканских конференциях.

Опубликованность результатов. По теме диссертации опубликовано 18 научных работ, в том числе 7 научных статей в изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертации доктора философии (PhD), 3 из них в зарубежных научных журналах.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и использованной литературы. Текст диссертации изложен на 121 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и востребованность проведённых исследований. Показана связь исследований с основными приоритетными направлениями развития науки и технологий в республике. Обсуждена степень изученности проблемы, сформулированы цель и задачи,

выбраны объекты, определен предмет исследований и описаны методы исследования. Изложена научная новизна, обоснована достоверность полученных результатов. Выявлена научная и практическая значимость результатов исследования. Приведены краткие сведения об апробации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

Первая глава **«Методы компьютерного моделирования наносистем»** посвящена литературному обзору по методам компьютерного моделирования наноразмерных систем и описанию основных положений этих методов. В общих чертах описываются стандартные виды семейства методов сильной связи, границы их применения и недостатки, а также анализируются пути устранения и решения указанных недостатков в рамках нетрадиционного метода сильной связи (НМСС), предложенного доктором З.М. Хакимовым.

Раскрыты преимущества нетрадиционного метода сильной связи по сравнению с другими полуэмпирическими методами и возможности развития НМСС для исследований таких систем, как заряженные системы, наноструктуры, где стандартные МСС не пригодны для расчетов.

В НМСС полная энергия системы взаимодействующих атомов, в отличие от системы изолированных атомов, представлена в следующем виде

$$E_{tot} = \sum_{\mu} \sum_{v>\mu} \frac{Z_{\mu}^{scr}(R_{\mu v}) Z_v^{scr}(R_{\mu v})}{R_{\mu v}} + \sum_{\mu} \sum_{v>\mu} \frac{Q_{\mu}(R_{\mu v}) Q_v(R_{\mu v})}{R_{\mu v}} + \sum_{\mu} \sum_{v>\mu} \sum_i \sum_j P_{\mu i, v j} H_{\mu i, v j} + \sum_{\mu} (E_{\mu} - E_{\mu}^0), \quad (1)$$

где μ и v ядра, i и j – атомные орбитали (АО); $Z_v^{scr}(R_{\mu v})$ и $Q_{\mu}(R_{\mu v})$ – заряды экранированных ядер в нейтральных атомах и заряды неточечных ионов; $R_{\mu v}$ – межатомные расстояния; H и P – матрицы гамильтониана и плотность электронов (порядков связи) систем; E_{μ}^0 и E_{μ} – полные энергии взаимодействующих и изолированных индивидуальных атомов (ионов) соответственно. Первый член в (1) – энергия взаимоотталкивания нейтральных атомов, второй – общая энергия ион-ионного взаимодействия, третий – энергия химической связи, а четвертый – энергия атомов.

Кроме того, с помощью комбинации с методом молекулярной динамики НМСС расчет электронных структур оказался весьма продуктивным, и здесь вместо расчета очень сложных интегралов, путем введения подгоночных параметров, сохраняя квантовомеханические характеристики расчетов, можно существенно сократить машинное время вычислений.

Во второй главе, названной **«Моделирование наноразмерных кластеров кремния»**, теоретически исследованы структуры и энергетические параметры чистых кластеров кремния Si_2 - Si_8 в нейтральном, отрицательно-, положительно- и двукратно положительно заряженном состояниях и стабильные конфигурации квази-одномерных полых кластеров кремния Si_{10} - Si_{36} . Для каждого кластера рассчитаны по несколько структур в

заряженных состояниях, для них определены самые стабильные структуры. Для всех Si_3 - Si_8 кластеров характерны замкнутые треугольные структуры и пространственные конфигурации на их основе. Нужно отметить, что нейтральные и отрицательно заряженные состояния имеют схожие структуры во всех кластерах, что объясняется близостью в них значения маделунговского взаимодействия между атомами. Из рис. 1 также видно, что ион-ионное взаимодействие больше в случае положительного заряда по сравнению с отрицательным зарядом.

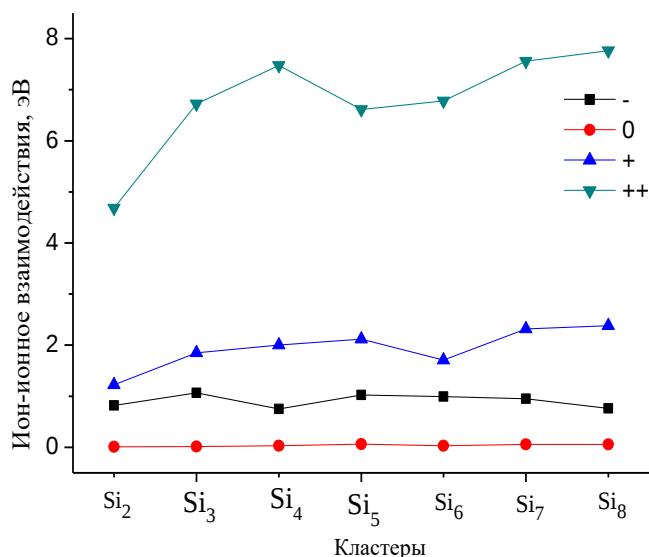


Рис. 1. Зависимости энергии ион-ионного взаимодействия в кластерах от их размера и зарядового состояния

По результатам наших моделирований зависимости энергий связи на атом от числа атомов в кластере (рис. 2) в нейтральном и положительно заряженном состояниях наиболее лучше совпадают с экспериментальными данными.

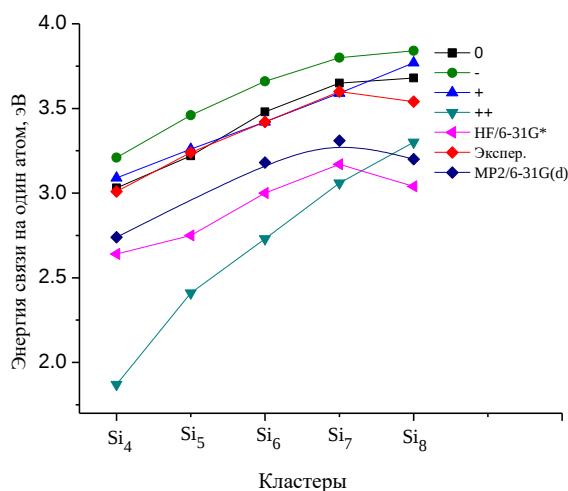


Рис. 2. Зависимости энергия связи на атом для малых кластеров от их размера и зарядового состояния

В малых $\text{Si}_2\text{-Si}_5$ кластерах наблюдается U(-) Андерсоновский эффект, т.е. неустойчивость нейтральной структуры по сравнению с отрицательно и положительно заряженными состояниями. По-видимому, отрыв и присоединение электрона в этих структурах происходит парами электронов и кластер меняет свое зарядовое состояние с отрицательного сразу на положительный и наоборот.

Для полых кластеров рассматривались три структуры – с расположением атомов в основаниях друг над другом так, что боковые грани являлись ромбами, и с развернутыми друг относительно друга основаниями таким образом, чтобы атомы боковых граней образовывали правильные многоугольники. Помимо этого строились искаженные структуры, полученные на основе структур второго типа.

В области размеров от 10 до 16 атомов кремния, с энергетической точки зрения, наиболее стабильными являются искаженные структуры, потерявшие симметрию, но сохранившие внутреннюю полость. Их энергии когезии сравнимы с энергиями когезии исследованных ранее квазиодномерных кластеров [Tereshchuk P.L., Khakimov Z.M., Umarova F.T., Swihart M.T. Growth Patterns of Silicon Clusters: Quasi-one-dimensional Clusters versus Diamond-like Clusters. // Phys. Rev. B. 2007, V76. C.125418-7], имеющих внутренние атомы вдоль центральной оси (рис.3). С увеличением размера кластеры с гексагональным основанием сохраняют либо удлиненную полую либо фуллереноподобную структуру. И они могут служить строительными блоками при синтезе нанопроволок кремния.

Пассивация водородом трехкоординированных торцевых атомов стабилизирует полую структуру удлиненных кластеров с гексагональным основанием вплоть до 36 атомов включительно. Стабилизация структуры

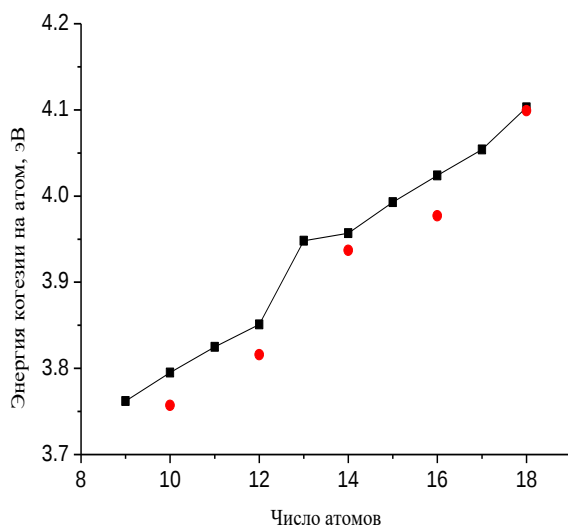


Рис. 3. Энергия когезии на атом для полых искаженных кластеров третьего типа (кружки) и кластеров предполагаемого канала роста с цепочкой внутренних атомов (черные квадраты)

фуллереноподобных кластеров достигается включением дополнительных атомов кремния по центральной оси кластера.

Третья глава «Влияние поверхностных состояний на структуру и стабилизацию наночастиц кремния» посвящена исследованию методов пассивации ненасыщенных поверхностных связей на структуру и стабилизацию наночастиц кремния. Водород используется в ряде технологических процессов при получении наночастиц кремния, например, термический метод получения из силана SiH_4 , и играет важную роль в формировании структуры нанокристаллического кремния. Для исследования влияния водорода на структуру ранее рассмотренных чистых малых кластеров кремния построены гидрогенизированные кластеры последовательным насыщением малых кластеров кремния различным количеством атомов водорода. Полученные результаты показывают, что гидрогенизированные структуры сильно отличаются от соответствующих структур чистых кластеров при одинаковом числе атомов кремния. В отличие от чистых кластеров для гидрогенизированных кластеров характерны незамкнутые структуры (рис. 4 и 5). Во многих кластерах нейтральные и двукратно положительно заряженные структуры имеют идентичные геометрии.

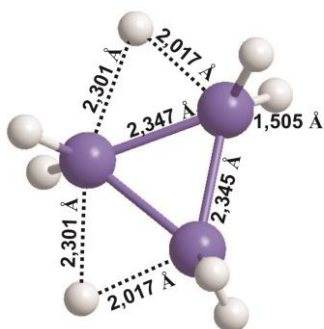


Рис. 4. Структура кластера Si_3H_8 .

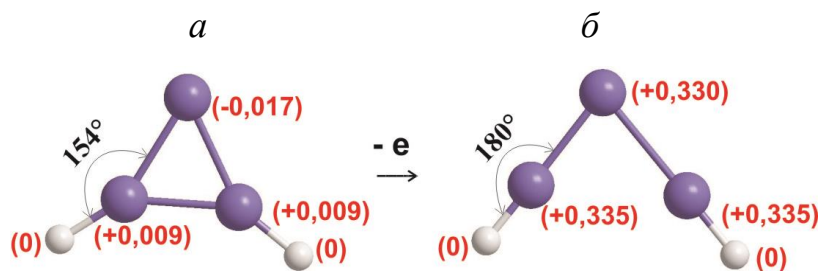


Рис. 5. Стабильные структуры кластеров Si_3H_2 (a) и $(\text{Si}_3\text{H}_2)^+$ (б)

Переход из частично разветвленной структуры в компактную циклическую форму происходит с ростом размера кластеров. При этом становятся заметны тетраэдрические связи, характерные для алмазоподобной геометрии, которая далее сохраняется в больших кластерах.

Далее исследуется влияние реконструкции поверхности и атомов водорода на структурную стабильность и энергетические характеристики наночастиц кремния. Здесь рассмотрены оптимизации структур алмазоподобных кластеров Si_{29} , Si_{38} , в результате димеризации поверхностей. Анализ результатов димеризации показывает, что оптимизированные геометрии алмазоподобных кластеров оказались чувствительны к модели первоначальной поверхностной реконструкции. Кластеры с димеризованными поверхностными атомами сохраняют свою структуру после оптимизации. В других случаях (при внедрении дополнительных атомов на поверхность в позиции, соответствующие тетраэдрической

междоузельной позиции в объемном кремнии, или при сглаживании поверхности удалением нескольких поверхностных атомов в возможно напряженных конфигурациях) оптимизированные геометрии кластеров дают структуры, не содержащие алмазоподобного ядра. Моделирование кластеров с различной поверхностной реконструкцией показало, что наиболее выгодная с энергетической точки зрения поверхность больших алмазоподобных кластеров, должна состоять из пентагональных фрагментов, прикрепленных к ядру с алмазоподобной структурой.

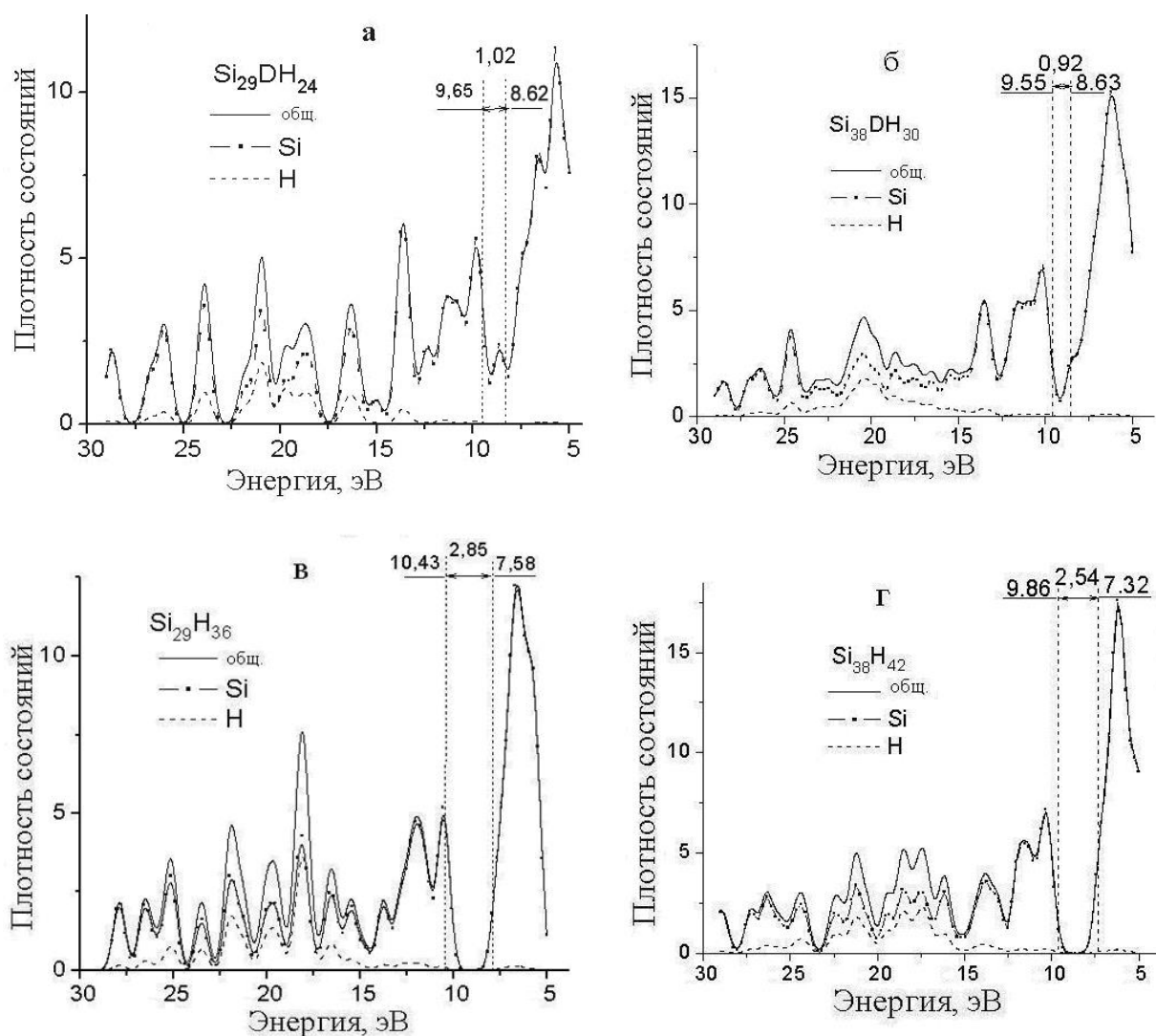


Рис. 6. Распределение плотности энергетических состояний кластеров $\text{Si}_{29}\text{DH}_{24}$ (а), $\text{Si}_{38}\text{DH}_{30}$ (б), $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ (в), $\text{Si}_{38}\text{H}_{42}$ (г). Сплошной линией показано общее распределение, штриховой линией – атомов кремния и пунктирной – атомов водорода. Вертикальные пунктирные линии показывают границы щели

Гидрогенизация поверхности приводит к изменению электронной и зонной структуры наноматериала, пассивации активных локальных уровней в запрещенной зоне и изменению электрофизических и оптоэлектронных свойств нанокремния. Пассивация поверхностных орбиталей меняет как

геометрическую, так и электронную структуру кластеров – меняется распределение зарядов на атомах, плотность энергетических состояний и ширина запрещенной зоны. Как видно из рисунка 6, для пассивированного водородом кластера $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ ширина запрещенной зоны составляет 2.7–3.0 эВ, в кластере $\text{Si}_{38}\text{H}_{42}$ – 2.54 эВ. В полностью пассивированных кластерах с поверхностной реконструкцией ширина запрещенной зоны немного меньше: 1.02 эВ для $\text{Si}_{29}\text{DH}_{24}$ и 0.92 эВ для $\text{Si}_{38}\text{DH}_{30}$.

Таким образом, рассчитаны оптимизированные структуры алмазоподобных и поверхностно-реконструированных (димеризованных) кластеров при пассивации ненасыщенных поверхностных орбиталей атомами водорода и составлены их модели в зависимости от числа атомов Si и H. Полученные результаты показывают, что пассивация поверхностных орбиталей меняет как геометрическую, так и электронную структуру кластеров и приводит к изменению распределения зарядов на атомах, плотности энергетических состояний и ширины запрещенной зоны.

Четвертая глава **«Исследование дефектных состояний в наночастицах кремния»** посвящена изучению дефектов в наночастицах кремния, где теоретически исследованы такие точечные дефекты в кремниевых наночастицах, как вакансии, водород, углерод, а также их влияние на стабильность структур и энергетические характеристики. На основе проведенных теоретических расчетов показано, что вакансия в чистом кластере Si_{29} является нестабильной, а в гидрогенизированном кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ является устойчивой и приводит к искажению его центральной части с переходом симметрии из T_d в C_{3v} . В гидрогенизированных кластерах с большим числом $\text{Si}_{38}\text{H}_{30}$ предпочтительными являются кластеры с вакансией. Водород в поверхностно-гидрогенизированном кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ находится в середине между связецентрированной точкой и точкой гексагональной конфигурации. Как и в объемном кремнии, в нанокластерах образование вакансии влияет на ширину запрещенной зоны. Последовательное добавление атомов водорода в полость вакансии приводит к постепенному уширению ширины запрещенной зоны. При внедрении третьего атома водорода щель между энергией высшей занятой (ВЗМО) и низшей свободной молекулярных орбиталей (НСМО) резко увеличивается (таблица 1). График зависимости значений энергий высшей занятой и низшей свободной молекулярных орбиталей от количества атомов водорода (рис.7), внедренных в вакансию, показывает, что после введения третьего атома водорода щель между ВЗМО и НСМО резко возрастает, затем стабилизируется и становится постоянной.

Внедрение атомов водорода в вакансию в кремниевых кластерах не приводит к существенным изменениям конфигурации кластера. Однако увеличение количества атомов водорода сопровождается возрастанием устойчивости кластера. При недостаточном насыщении оборванных связей вакансии атомами водорода, один из атомов водорода образует мостиковую трехцентровую связь Si-H-Si, тогда как остальные жестко связываются с кремнием образованием ковалентной связи. Полное удаление локальных

уровней из запрещенной зоны n-Si и расширение щели происходят при введении третьего атома водорода в полость вакансии, что объясняется отсутствием несвязанных болтающихся орбиталей атомов кремния, первых соседей вакансии.

Таблица 1

Энергии ВЗМО, НСМО и щели между ними для кластеров с различной гидрогенизацией вакансии

Кластеры	E_{HOMO} , эВ	E_{LUMO} , эВ	E_g , эВ
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$	9.65	8.62	1.02
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24}\text{V}$	9.14	9.05	0.09
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24}\text{VH}$	8.99	8.90	0.10
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24}\text{VH}_2$	9.18	8.96	0.22
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24}\text{VH}_3$	9.47	8.52	0.95
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24}\text{VH}_4$	9.54	8.56	0.98

Энергия связи углерода с кластером кремния принимает наибольшее значение в поверхностно-димеризованном кластере Si_{29} . Полученные результаты расчетов приведены в таблице 2, откуда видно, что энергия связи атома углерода с кластером кремния наиболее сильно выражается для чистого кластера Si_{29} с болтающимися орбиталями на поверхности, что очевидно связано с его повышенной активностью. Это подтверждается также тем, что в отрицательно заряженном кластере сильнее связь с углеродным атомом. Локальные уровни, обусловленные примесным атомом углерода в запрещенной зоне кластера, незначительно влияют на края зон, т.е. на значения ВЗМО и НСМО.

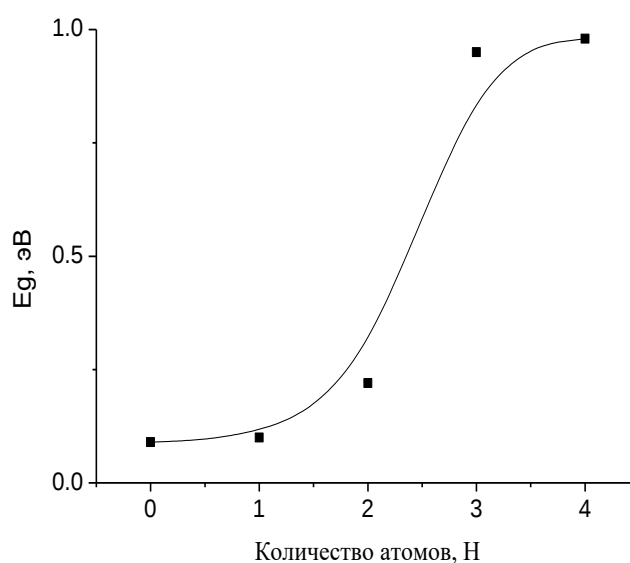


Рис. 7. Зависимость изменений энергий ВЗМО-НСМО от количества внедряемых атомов водорода в гидрогенизированном кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ с вакансией в центре

Таблица 2
Энергетические параметры междоузельного атома углерода в нанокластере кремния

Кластеры	Энергия связи углерода с кластером, эВ	$E_{\text{ВЗМО}}$	$E_{\text{НСМО}}$	E_g
$\text{Si}_{29}:\text{C}(-)$	12.59	8.61	8.38	0.23
$\text{Si}_{29}:\text{C}(+)$	12.29	8.26	8.25	0.01
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}:\text{C}(-)$	7.51	9.35	9.06	0.29
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}:\text{C}(+)$	7.85	8.86	8.37	0.49
$\text{Si}_{29}\text{H}_{36}:\text{C}(-)$	6.61	10.39	8.96	1.43
$\text{Si}_{29}\text{H}_{36}:\text{C}(+)$	6.78	9.53	9.04	0.49

Это связано с тем, что, во-первых, междоузельные примеси вводят обычно неглубокие уровни в запрещенную зону, во-вторых, атом углерода по энергетическим характеристикам и валентному состоянию мало отличается от кремния и поэтому такая примесь даже в замещенном положении не вносит глубоких локальных уровней.

Отрицательно заряженное состояние углерода сильнее связывается решеткой и дает мелкие уровни в запрещенной зоне нанокремния.

Энергия связи дефектного комплекса углерод-водород с кластером кремния уменьшается в гидрогенизированных кластерах. Из табл. 3 видно, что энергия связи дефектного комплекса углерод-водород с кластером кремния уменьшается в гидрогенизированных кластерах.

Таблица 3
Энергетические параметры междоузельного атома углерода с водородом в нанокластера кремния

Кластеры	Энергия связи дефектного комплекса, эВ	$E_{\text{ВЗМО}}$	$E_{\text{НСМО}}$	E_g
$\text{Si}_{29}:\text{CH}$	12.34	8.29	8.19	0.10
$\text{Si}_{29}:\text{CH}(+)$	12.58	8.04	7,93	0.11

Si ₂₉ :CH(-)	12.15	8.57	8.47	0.10
Si ₂₉ H ₂₄ :CH	7.53	8.67	8.15	0.52
Si ₂₉ H ₂₄ :CH(+)	7.68	8.06	7.11	0.95
Si ₂₉ H ₂₄ :CH(-)	7.45	9.31	9.22	0.09

В сформированных кластерах положительное и нейтральное зарядовые состояния дефекта проявляют глубокие локальные уровни в запрещенной зоне, тогда как отрицательное состояние дает мелкий уровень над валентной зоной нанокластера.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе полученных результатов исследования, проведенного по теме диссертации доктора философии (PhD) «Структура и электронные свойства моделированных наночастиц кремния», представлены следующие выводы:

1. На основе изучения различных теоретических методов моделирования нанокластеров кремния показано, что метод НМСС может быть эффективно использован для ковалентно-связанных наночастиц, т.е. для расчета геометрической структуры, энергии связи, потенциала ионизации, энергии электронного сродства и ширины запрещенной зоны наноструктур и построения компьютерных моделей их образования.

2. Выявлено, что для чистых кремниевых кластеров типа Si₃-Si₈ характерны треугольные структуры и пространственные конфигурации на их основе. Для гидрогенизированных малых кластеров характерна разветвленная структура с переходом в циклическую форму с характерными для алмазоподобной геометрии тетраэдрическими связями.

3. Показано, что в малых Si₂-Si₅ кластерах наблюдается U(-) Андерсоновский эффект, т.е. неустойчивость нейтральной структуры по сравнению с отрицательными и положительными заряженными состояниями.

4. Показан стабильный рост полых кластеров кремния с гексагональным основанием. Пассивация ненасыщенных связей торцевых атомов, а также внедрение дополнительных атомов вдоль центральной оси приводит к увеличению размера стабильного полого кластера.

5. Выявлена чувствительность структуры кластеров к состоянию поверхности и показано, что структурные и электронные свойства поверхностно димеризованных кластеров отличаются от свойств гидрогенизированных кластеров, которые обусловлены чувствительностью состояний поверхности кластеров к оптимизации геометрии димеризованных кластеров и изменениям электронной структуры.

6. Показано, что в нейтральном и положительно заряженном кластерах водород стабилизируется внутри кластера в середине между связецентрированной точкой и точкой гексагональной конфигурации.

7. Установлено, что вакансия в чистом кластере Si_{29} неустойчива, а в гидрогенизированном кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ стабильна. Выявлено, что полное насыщение оборванных связей в области вакансии не приводит к существенным изменениям конфигурации кластера, а приводит к формированию стабильного комплекса VN_4 . Увеличение количества атомов водорода сопровождается возрастанием ширины запрещенной зоны кластера. При недостаточном насыщении оборванных связей вакансии атомами водорода, один из атомов водорода образует мостиковую трехцентровую связь Si-H-Si , тогда как остальные жестко связываются с кремнием с образованием ковалентной связи.

8. Рассчитаны и получены модели междоузельных состояний атома углерода в кластерах кремния в различных зарядовых состояниях. Выявлено, что атом углерода формирует мостиковую связь с двумя атомами кремния, располагаясь в междоузельной позиции, образуя мелкие уровни в запрещенной зоне чистого Si_{29} .

9. Показано, что внедрение водорода в углеродсодержащие кластеры приводит к формированию дефектного комплекса углерод-водород, энергия связи которого уменьшается в гидрогенизированных кластерах, а ширина энергетическая щель меняется в зависимости от зарядового состояния дефекта, при этом образуются как глубокие, так и мелкие уровни в запрещенной зоне над валентной зоной.

**SCIENTIFIC COUNCIL No.DSC.27.06.2017.FM/T.33.01 ON AWARD OF
SCIENTIFIC DEGREES AT THE INSTITUTE OF NUCLEAR PHYSICS,
ASTRONOMICAL INSTITUTE, NATIONAL UNIVERSITY OF
UZBEKISTAN**

INSTITUTE OF NUCLEAR PHYSICS

NORMURODOV ASROR BAZAROVICH

**STRUCTURE AND ELECTRON PROPERTIES OF SIMULATED
SILICON NANOPARTICLES**

01.04.07 – Condensed matter physics

**DISSERTATION ABSTRACT OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD)
ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

Tashkent – 2019

The theme of the dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered by the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under B2018.4.PhD/FM294.

The doctoral (PhD) dissertation was carried out at the Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation was posted in three (Uzbek, Russian, English (resume)) languages on the website of the Scientific Council at www.inp.uz and on the website of “Ziynet” Information and Educational portal at www.ziynet.uz.

Scientific supervisor:	Tashmetov Mannab Yusupovich Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Official opponents:	Djumanov Safarali Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor Gulyamov Gafur Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Leading organization:	Tashkent University of information technologies named after Muhammad Al-Kharizmi

The defense of the dissertation will be held on “___” _____ 2019, at ___ at the meeting of the Scientific Council No.DSc.27.06.2017.FM/T.33.01 at the Institute of Nuclear Physics, Astronomical Institute, National University of Uzbekistan (Address: INP, Ulugbek settlement, 100124 Tashkent city. tel. (+99871) 289-31-18; fax (+99871) 289-36-65; e-mail: info@inp.uz).

The doctoral (PhD) dissertation can be looked through at the Information Resource Centre of the Institute of Nuclear Physics (registered under No.____) Address: INP, Ulugbek settlement, 100124 Tashkent city. tel. (+99871) 289-31-19.

The abstract of dissertation was distributed on “___” _____ 2019.
(Registry record No. ____ dated “___” _____ 2019.)

I. Nuritdinov
Temporary Chairman of the Scientific Council
on Award of Scientific Degrees,
D.Ph.-M.S., Professor

E.M. Tursunov
Scientific Secretary of the Scientific Council
on Award of Scientific Degrees,
D.Ph.-M.S., Senior Researcher

I. Nuritdinov
Chairman of the Scientific Seminar of the Scientific
Council on Award of Scientific Degrees,
D.Ph.-M.S., Professor

INTRODUCTION (abstract of the PhD dissertation)

Topicality and relevance of the theme of the dissertation. Study of the properties of nanoparticles formed in various semiconductor materials and their compounds is one of the priorities for the development of materials science and modern solid-state nanoelectronics at present. Theoretical and experimental studies and computer simulation of the formation of nanostructures in semiconductor crystals cover a wide range of tasks, ranging from technological methods for producing nanoparticles, studying the physical processes occurring during their formation, the stability of their crystalline structure to producing nanocrystals with new properties and developing on their basis products and devices of the new generation. To study the parameters and properties of semiconductor nanoparticles, a number of review articles have been published in various international scientific journals. These studies are based mainly on the experimental results obtained for nanoparticles and nanostructures, while theoretically calculated workings of parameters of nanosystems using computer simulation methods can predict many of their properties.

Today, research conducted in the field of computer modeling is one of the relatively new and relevant areas of study of nanocrystals and allows us to predict and identify the optimal parameters of the crystal structure and electronic properties of the nanoparticles. Monocrystalline silicon is one of the main materials of modern semiconductor micro- and nano- electronics. If we consider the possibility of forming small clusters with limited sizes in the base material, then these cluster containing systems represent a new type of materials which exhibit properties observed in both molecular and atomic physics and in condensed matter physics. In this regard, study of the processes of formation of clusters, the identification of their structural and energy parameters and electronic properties by computer simulation methods is one of the current relevant areas of nanomaterial science.

The Republic pays great attention to the study of the fundamentals of obtaining materials containing nanostructures. The formed nanocrystals in the matrix of the materials under study will make it possible to manufacture on their basis various products for optoelectronics, photonics and semiconductor electronics, as well as conducting basic research in this direction at the world level. The obtained fundamental results on silicon nanoparticles are of great importance and can be the basis for the further development of science in our country and its practical application are reflected in the Action Strategy for the Further Development of the Republic of Uzbekistan for 2017-2021¹.

The studies conducted in this dissertation correspond to the tasks stipulated in the Decrees of the President of the Republic of Uzbekistan No. UP-4947 “On the Action Strategy for the Further Development of the Republic of Uzbekistan for 2017–2021” dated February 2, 2017, No. UP-4958 “On Further the improvement

¹ Decree of the President of the Republic of Uzbekistan “On the Strategy for the Further Development of the Republic of Uzbekistan” No. 4947 of 07 February 2017

of the system of postgraduate education” dated February 16, 2017, in the Decree of the President of the Republic of Uzbekistan No. PP-2789" On measures to further improve the activities of the Academy of Sciences, organization, management and financing of scientific research activity "on February 17, 2017, as well as in other legal documents adopted in this area.

Conformity of research to priority directions of development of science and technologies of the Republic of Uzbekistan. The research work has been performed in accordance with the Republic of Uzbekistan priority directions of science and technology development: II “Power, energy and resource saving”.

Degree of study the problem.

Experimental and theoretical research in the field of small silicon nanoparticles is conducted by well-known domestic and foreign scientists, including Indian (K. Raghavachari), American (L.A. Curtis, G. Belomoin, S.E. Douglas, M.T. Swihart), Chinese (J.C. Yang), Russian (A. A. Kuzubov), Turkish (M. Durandurdu), Japanese (Y. Watanabe) and others.

The small clusters of $\text{Si}_2\text{-Si}_8$, which are the nucleus states of nanoparticles, were studied using the non-empirical Hartree-Fock method with a polarized basic set of 6-31G *; charged states of these clusters are simulated; The stability of small hollow clusters containing up to 20 silicon atoms is shown. The detection of luminescent properties in the visible light region of small silicon nanoparticles with a size of ~ 1 nm made it possible to adopt a model of a particle containing 29 atoms. The problem of stabilization of the surface and its influence on the properties of the cluster gave rise to a number of works on the surface reconstruction, by saturating it with hydrogen and other reagents; the important role of hydrogen in the growth of silicon nanoparticles is revealed. However, the issue of the final cluster surface model has not yet been resolved and requires further development of experimental and theoretical studies. In this case, hydrogen is not only a passivator of the cluster surface, but also forms independent defective states within the cluster.

Theoretical calculations of the energy characteristics of silicon nanoparticles were previously carried out by semi-empirical and empirical methods, which yielded mainly qualitative results. While the computational cost of first-level methods is still quite high, so these methods are impractical for modeling most systems. Developed and further developed by Uzbek scientists (A.Sh. Makhmudov, Z.M. Khakimov, F.T. Umarova, and A.P. Mukhtarov), the non-standard tight-binding method (NTBM) in combination with molecular dynamics (MD) allowed modeling clusters silicon containing up to 50 atoms with an accuracy comparable to the results of ab-initio calculations.

Further development and application of NTBM in combination with MD for clusters containing impurity and defective states will not only systematize, deepen and expand the ongoing studies of small silicon nanoparticles, but also increase the applicability of the computer modeling approach for solving experimental work.

Connection of dissertational research with the plans of scientific research works of the scientific research institution, where the dissertation was conducted.

The work in this dissertation was carried out within the framework of research projects of the Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan on the topics: FA-F2-F066 + F072 “Properties and structures of semiconductor materials containing low-dimensional nanocomposites and nanoparticles” (2007–2011); F2-FA-F121 “Formation of micro-inhomogeneities and their influence on the fundamental properties of neutron-doped silicon during hydrogenation” (2012–2016); OT-F2-20 “Low-dimensional structural transformations in doped silicon under radiation exposure and their influence on the properties of a single crystal” (2017–2020).

The aim of the research is the creation and optimization of a computer model of silicon clusters based on theoretical calculations of their geometrical and structural parameters and the study of the influence of defect states on the properties and stability of the formed nanoparticles.

The tasks of the research:

- computer simulation of small Si_2 - Si_8 clusters and hydrogenated Si_2H_4 - Si_8H_{16} clusters;

- quantum chemical modeling of nanoscale ideal silicon clusters containing 29 and 38 atoms;

- study of the surface model of the silicon cluster Si_{29} and Si_{38} , reconstruction of the surface structure and dimerization of atoms on the surface;

- study of stable configurations of hollow silicon clusters Si_{12} - Si_{36} ;

- study of the effect of passivation of surface atoms of silicon clusters Si_{29} and Si_{38} by hydrogen atoms on their stability;

- identification of the effect of impurities on the electronic structure and stability of silicon clusters.

The objects of the research: are nano-sized silicon clusters containing up to 38 atoms.

The subjects of the research: are the structural and energy parameters and electronic properties of nano-sized silicon clusters.

Methods of research. To solve these problems, a combined approach of a non-standard self-consistent method of tight-binding with the molecular dynamics method was used. The choice of this method is due to the fact that the non-standard method of strong coupling allows one to carry out calculations and model clusters of sufficiently large sizes with the accuracy of first-principle methods.

The scientific novelties of the research are as follows:

- it is found that triangular structures and spatial configurations based on them are characteristic of pure silicon clusters of the Si_3 - Si_8 type, and a branched structure is observed with hydrogenated small clusters with a transition to a cyclic form with tetrahedral bonds characteristic of diamond-like geometry;

- it is shown that the clusters at the base of which lie regular polygons consisting of four, five, and seven atoms do not retain the hollow structure during growth during optimization, while the clusters with a hexagonal base maintain stable growth of hollow silicon clusters;

- the sensitivity of the cluster structure to the state of the surface was first established and it was shown that the passivation of surface orbitals with hydrogen

and surface reconstruction change the geometric dimensions and electronic structure of silicon clusters Si_{29} and Si_{38} within 0.71–1.09 nm, and the width of the forbidden gap is within 1.02–2.85 eV, respectively;

it is found that the vacancy in the $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ cluster is stable compared to Si_{29} and the complete saturation of dangling bonds in the hydrogen vacancy region leads to the formation of a stable VH_4 complex with preservation of the initial cluster configuration;

it is shown that an increase in the number of embedded hydrogen atoms to 4 in silicon clusters containing vacancies is accompanied by an increase in the band gap of the cluster to 0.98 eV, and one of the hydrogen atoms forms a bridging three-center bond Si-H-Si , while the others are rigidly associated with the formation of a covalent bond with silicon;

Practical results of the research are as follows:

it is shown that the nonstandard tight-binding method (NTBM) can effectively be used to study covalently bonded nanoparticles to calculate the geometric structure, binding energy, ionization potential, electron affinity energy, and nanostructure gap width and build computer models of their formation

it is found that the U (-) Anderson effect is observed in small Si_2 – Si_5 clusters, i.e. instability of the neutral structure compared with negative and positive charged states;

it is shown that in neutral and positively charged clusters, hydrogen is stabilized inside the cluster in the middle between the bonded point and the point of hexagonal configuration.

it is shown that the presence of carbon in a pure Si_{29} cluster leads to the formation of shallow energy levels, and the introduction of hydrogen into carbon-containing clusters leads to the formation of a defective carbon-hydrogen complex.

The reliability of the research results is justified by the coincidence of the results of the calculation of the sizes and structures of nanoparticles with the data, the use of independent methods and the consistency of the data obtained with existing physical principles and concepts.

Scientific and practical significance of the results of research. The scientific significance of the research results lies in the fact that the conducted quantum chemical studies are necessary to create the scientific foundations of nanotechnology, which simplifies and accelerates the creation and implementation of the latter.

The practical significance of the results of the study lies in the fact that the results of calculations of the shape, surface structure and point defects in silicon nanoscale clusters using computer simulation methods make it possible to predict the stable forms of silicon nanoparticles, control the formation of silicon nanoparticles and silicon nanowires, obtain doped silicon nanocrystalline clusters with the necessary properties for electronics and photonics.

Application of the research results. Based on the results of the study of the structure and electronic properties of simulated silicon nanoparticles:

Geometric structures identified for pure silicon Si_3 – Si_8 and for hydrogenated small clusters, the interatomic distances and binding energies of

small silicon clusters have been used by foreign researchers (links in international scientific journals Journal of Applied and Computational Mathematics, 2017; Journal of Computational nanotechnology, 2016; International Journal of Scientific Research in Science and Technology (IJSRST), 2016; Journal of Modeling and Numerical Simulation of Material Science, 2016; Journal of Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematica, 2016) for comparing the equilibrium interatomic distances and bond energy values. The use of the results made it possible to significantly clarify the area of application of the methods based on the tight-binding approximation, and to determine the structural and energy characteristics of small silicon clusters;

established provisions that the clusters at the base of which lie regular polygons consisting of four, five, and seven atoms do not retain the hollow structure during growth during optimization, while the clusters with a hexagonal base maintain stable growth of hollow silicon clusters; that the passivation of surface orbitals with hydrogen and surface reconstruction change the geometric dimensions and electronic structure of silicon clusters Si_{29} and Si_{38} within 0.71–1.09 nm, and the width of the forbidden gap is within 1.02–2.85 eV, respectively, were used to fundamental project OT-F2-77 "Improving methods for predicting the reliability of semiconductor devices based on modeling with regard to internal structure defects" (2017-2021). (letter of the Ministry of Higher and Secondary Special Education of the Republic of Uzbekistan No. 89-03-2496 of 15 June, 2019). The use of these results allowed to identify fluctuations in surface charges at the interface and unstable point defects in semiconductor structures that were used to establish the physical mechanisms of unstable point defects located in the surface layer of the semiconductor.

established results about stability of a vacancy in the $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ cluster and the formation of a stable VH_4 complex with preservation of the initial cluster configuration; about increasing in the number of embedded hydrogen atoms to 4 in silicon clusters containing vacancies is accompanied by an increase in the band gap of the cluster to 0.98 eV, on the formation of one of the hydrogen atoms forms a bridging three-center bond Si-H-Si , were used to project FA-F4-F061 "Development of ion-plasma technology for producing silicon with nanoscale structures" (2015-2017). (Letter of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan No. 2/1255-1661 of 10 June, 2019). The established patterns were used in the analysis of nanoparticles obtained in the project to understand their properties and structure.

Approbation of the work. The main results of the dissertation were presented and discussed at 6 international and 3 republican scientific conferences.

Publication of the research results. On the topic of the dissertation, 18 scientific papers were published, including 7 articles in journals recommended by the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan, 3 of them in the international journals issued abroad.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation was presented on 121 pages consisting of an introduction, four chapters, conclusions and a list of used literature.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

1. Mukhtarov A.P., Normurodov A.B., Sulaymonov N.T., Umarova F.T., Makhkamov Sh. Structure and Charge States of the Selected Hydrogenated Silicon Clusters $\text{Si}_2\text{-Si}_8$ by Non-Conventional Tight-Binding Method // Journal Nano- and Electronic Physics. -Sumu (Ukraine), 2016. -V.8, N2. -P.02009-1-02009-8. (№3. Scopus, IF=0.42)
2. Mukhtarov A.P., Normurodov A.B., Sulaymonov N.T., Umarova F.T. Charge States of Bare Silicon Clusters up to Si_8 by Non-Conventional Tight-Binding Method // Journal Nano- and Electronic Physics. -Sumu (Ukraine), 2015. - V.7, N1. -P. 01012-1-01012-7. (№3. Scopus, IF=0.42)
3. Нормуродов А.Б., Мухтаров А.П., Холиков П., Умарова Ф.Т., Сулаймонов Н.Т., Бакиев С., Махкамов Ш.М. Влияние пассивации поверхности на структуру и электронные свойства кластеров кремния // Узбекский физический журнал. -Ташкент, 2014. -№1(16). -С.35-41(01.00.00. №5).
4. Нормуродов А.Б., Махкамов Ш.М., Мухтаров А.П., Ташметов М.Ю., Сулаймонов Н.Т., Умарова Ф.Т. Квантовохимическое моделирование междоузельной примеси атома водорода в кластере кремния Si_{29} // Научно-технический журнал. Ферганского политехнического института. -Фергана, 2014. -С.38-41 (05.00.00. №20).
5. Umarova F.T., Normurodov A.B. And Turaeva N.N. Size-dependent structural properties of quasi-one-dimensional silicon clusters // Physica status solidi(c). - Wiley-Blackwell (Germany), 2012. -V. 9, Issue 10-11. - P.1904–1907. (№3. Scopus, IF=0.83)
6. Умарова Ф.Т., Терещук П.Л., Нормуродов А.Б. О стабильности полых наноразмерных кластеров кремния // Узбекский физический журнал. – Ташкент, 2010. -№3(12).- С.117-120 (01.00.00. №5).
7. Умарова Ф.Т., Мухтаров А.П., Терещук П.Л., Сулайманов Н.Т., Нормуродов А.Б., Свихарт М.Т. Квантовохимическое исследование полых наноразмерных кластеров кремния // Узбекский физический журнал. – Ташкент, 2009. -№4 (11). -С.268-272 (01.00.00. №5).

II бўлим (II часть; II part)

8. Ташметов М.Ю., Сулайманов Н.Т., Нормуродов А.Б., Махкамов Ш., Умарова Ф.Т., Хугаев А.В, Холмедов Х.М. Исследование взаимодействия точечных дефектов углерода с водородом. // 7-я Международная конференция IPES-7 18-19 мая 2018. - Ташкент, 2018. -С. 125.
9. Ташметов М.Ю., Сулайманов Н.Т., Нормуродов А.Б., Махкамов Ш.М., Умарова Ф.Т., Хугаев А.В., Холмедов Х.М. Моделирование параметров точечных дефектных центров углерода в наночастицах кремния. // XII

- Международная конференция «КРЕМНИЙ-2018». -Черноголовка (Россия), 2018. -С. 102.
10. Махкамов Ш., Нормуродов А.Б., Сулаймонов Н.Т., Ташметов М.Ю. Взаимодействие водорода с примесными и собственными точечными дефектами в наночастицах кремния. // 11-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика». -Алмата (Казахстан), 2017. -С.234.
 11. Нормуродов А.Б., Мухтаров А.П., Сулайманов Н.Т., Умарова Ф.Т. Водородная пассивация собственных точечных дефектов в наночастицах кремния // 9-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика» 24-27 сентября 2013. -Алматы (Казахстан), 2013. - С.93.
 12. Umarova F.T., Tereshchuk P.L., Normurodov A.B. Quasi-One-Dimensional Silicon Clusters as Elements of Novel Nanowires // Nanodevices and Nanomaterials for Ecological Security, Y.N. Shunin and A.E. Kiv (eds.), NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics. -Springer (Germany), 2012. Chapter 13. -P.143-148.
 13. Sulaymonov N.T., Normurodov A.B., Mukhtarov A.P., Makhkamov Sh., Tursunov N.A., Umarova F.T., Khudayberganov S.B. Interaction of the hydrogen with hydrogenised silicon clusters // International conference “Nuclear science and its application” 25-28 September, 2012.: Book of Abstracts. - Samarkand, 2012. - P.207.
 14. Normurodov A.B., Mukhtarov A.P., Sulaymonov N.T., Umarova F.T., Tereshchuk P.L. Quantum chemical simulation of surface effects in nanosilicon // International conference “Nuclear science and its application”, 25-28 September, 2012: Book of Abstracts. – Samarkand, 2012. -P.208.
 15. Сулайманов Н.Т., Умарова Ф.Т., Мухторов А.П., Нормуродов А.Б.. Теоретические модели механизмов взаимодействий наночастиц Si_mH_n в газофазной среде // 8-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика» 20-23 сентября 2011: Тезисы докладов. -Алматы (Казахстан), 2011. -С. 344-345.
 16. Сулайманов Н.Т., Умарова Ф.Т., Турсунов Н.А., Мухтаров О.П., Терещук П.Л., Нормуродов А.Б., Свихарт М.Т. Влияние способа пассивации пустых поверхностных связей и наличия вакансии на фотолюминесцентные свойства кластеров кремния // 7-я международная конференция «Ядерная и радиационная физика» 8-11 сентября 2009: Тезисы докладов. -Алматы (Казахстан), 2009. -С.171.
 17. Терещук П.Л., Умарова Ф.Т., Мухтаров А.П., Сулейманов Н.Т., Нормуродов А.Б., Свихарт М.Т. Квантохимическое исследование структуры и стабильности полых сфероидальных кластеров кремния // 7-международная конференция «Ядерная и радиационная физика» 8-11 сентября 2009.: Тезисы докладов. -Алматы (Казахстан), 2009. -С.174-175.
 18. Sulaymanov N.T., Mukhtarov A.P., Swihart M.T, Tereshchuk P.L., Normurodov A.B., Umarova F.T., Tursunov N.A. Influence of a vacancy on structural parameters and energetic characteristics of the silicon Si_{38} and $\text{Si}_{38}\text{H}_{30}$ clusters // The Seventh International Conference «Modern problems of nuclear physics» 22-25 September, 2009: Book of Abstracts. -Tashkent, 2009. -P.138-140.