

**ФАРҒОНА ПОЛИТЕХНИКА ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ
ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА
ДОКТОРИ ИЛМИЙ ДАРАЖАСИНИ БЕРУВЧИ
PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

**ТЕРМИЗ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ
ТОШКЕНТ ДАВЛАТ ТЕХНИКА УНИВЕРСИТЕТИ**

ТУРСУНОВ МАМАСОБИР ОЧИЛДИЕВИЧ

**КРЕМНИЙ ПАНЖАРАСИДАГИ МАРГАНЕЦ ВА VI ГУРУХ
КИРИШМА АТОМЛАРИНИНГ ЎЗARO ТАЪСИРЛАШУВИ**

01.04.07 – Конденсирланган ҳолат физикаси

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

Фарғона-2022

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

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

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

Турсунов Мамасобир Очилдиевич

Кремний панжарасидаги марганец ва VI гуруҳ киришма атомларининг ўзаро таъсирлашуви3

Турсунов Мамасобир Очилдиевич

Взаимодействия атомов марганца с примесями VI группы в решетке кремния.22

Tursunov Mamasobir Ochildiyevich

Interaction of manganese atoms with group VI impurities in the silicon lattice. 41

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ
List of published works. 45

**ФАРҒОНА ПОЛИТЕХНИКА ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ФИЗИКА-
МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ ИЛМИЙ
ДАРАЖАСИНИ БЕРУВЧИ PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 РАҚАМЛИ
ИЛМИЙ КЕНГАШ**

**ТЕРМИЗ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ
ТОШКЕНТ ДАВЛАТ ТЕХНИКА УНИВЕРСИТЕТИ**

ТУРСУНОВ МАМАСОБИР ОЧИЛДИЕВИЧ

**КРЕМНИЙ ПАНЖАРАСИДАГИ МАРГАНЕЦ ВА VI ГУРУХ
КИРИШМА АТОМЛАРИНИНГ ЎЗARO ТАЪСИРЛАШУВИ**

01.04.07 – Конденсирланган ҳолат физикаси

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

Фарғона-2022

Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси **Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2022.2.PHD/FM420 рақам билан рўйхатга олинган.**

Диссертация Термиз давлат университети ва Тошкент давлат техника университетига бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (www.ferpi.uz) ва «ZiyoNet» ахборот-таълим порталида (www.ziyounet.uz) жойлаштирилган.

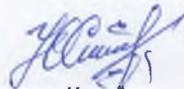
Илмий раҳбар:	Илиев Халмурат Миджитович физика-математика фанлари доктори, профессор.
Расмий оппонентлар:	Расулов Рустам Явқачович физика-математика фанлари доктори, профессор. Хажиев Мардонбек Улугбекович физика-математика фанлари номзоди, катта илмий ходим.
Етакчи ташкилот:	Самарқанд давлат университети

Диссертация химояси Фарғона политехника институти ҳузуридаги фалсафа доктори илмий даражасини берувчи PhD.03.27.02.2020.FM.106.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2022 йил «10» 09 соат даги мажлисида бўлиб ўтди. Манзил: 150107, Ўзбекистон, Фарғона шаҳри, Фарғона кўчаси, 86-уй, Тел.: (+99873) 241-13-03; факс: (+99873) 241-12-06; e-mail: uzferfizika@mail.ru, Фарғона политехника институти мажлислар зали.

Диссертация билан Фарғона политехника институтининг ахборот-ресурс маркази илмий услубий бўлимида танишиш мумкин. (113 рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 150107, Фарғона шаҳри, Фарғона кўчаси, 86-уй, Тел.: (+99873) 241-13-03.

Диссертация автореферати 2022 йил «29» 08 куни тарқатилди.
(2022 йил «29» 08 даги 0064 рақамли реестр баённомаси)




Н.Х.Юлдашев
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш раиси, физика-
математика фанлари доктори,
профессор.


Б.З.Полнов
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш котиби, физика-
математика фанлари бўйича фалсафа
доктори, доцент.


К.Э. Онарқулов
Илмий кенгаш ҳузуридаги
илмий даражалар берувчи илмий
семинар раиси, физика-математика
фанлари доктори, профессор.

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Жаҳонда яримўтказгичлар физикаси фаол ривожланмоқда, бунда кремний кристаллига киришма атомларини киритиш орқали, асосий материалдан фарқ қиладиган янги хусусиятларга эга бўлган материалларни олишга катта эътибор қаратилмоқда. Ҳозирги кунда ривожланган мамлакатларда қуёш энергияси ишлаб чиқаришни ривожлантириш ва таннархини янада камайтириш режа қилинган. Қуёш энергиясини ишлаб чиқариш технологияси бир мунча мураккаб ва қимматбаҳо хом ашё ва ускуналарни талаб қилади. Шунинг учун материал матричасига киритилган киришма атомлар ҳосил қилган янги элементар ячейкалари бўлган кремнийнинг истиқболли функционал имкониятларини ўрганиш, шунингдек, бундай материалларни микро ва оптоэлектроника, спинтроника ва конденсирланган ҳолатлар физикасининг бошқа соҳаларида амалий қўллаш муҳим вазифа ҳисобланади.

Жаҳонда киришма атомлари билан легирланган кремнийдаги номувозанат жараёнлар шаклланишининг технологик ва термодинамик шароитларини, кремний материалида янги физик ҳодисаларни, эффектларни аниқлаш ҳамда уларнинг функционал имкониятлари асосида янги қуёш элементлари ва датчикларни яратишга катта аҳамият берилмоқда. Бу борада мақсадли илмий тадқиқотларни, жумладан, бошланғич яримўтказгич материалнинг зарур электрофизик параметрлари ва киришма атомларнинг таркибини аниқлаш, киришма атомларнинг табиати билан боғлиқ бўлган легирлаш усуллари танилаш, кремний асосида янги материал олиш ҳамда уларнинг функционал имкониятларидан амалиётда кенг фойдаланиб самарадор қуёш элементларини ва датчикларни яратиш борасида илмий изланишларни олиб бориш муҳим вазифалардан ҳисобланмоқда.

Республикамызда қайта тикланувчи энергия манбаларидан кенг фойдаланиш ва самарадорлигини оширишга ёрдам берадиган янги материаллар олиш бўйича тадқиқотлар ўтказиш ва уларни амалда қўллаш бўйича кенг қўламли чора-тадбирлар амалга оширилмоқда. 2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тараққиёт стратегиясида, жумладан «Иқтисодий электр энергияси билан узлуксиз таъминлаш ҳамда “Яшил иқтисодий” технологияларини барча соҳаларга фаол жорий этиш, иқтисодий энергия самарадорлигини 20 фоизга ошириш»¹ бўйича вазифалари белгиланган. Ушбу вазифаларни амалга оширишда, янги типдаги бинар комплексларга эга бўлган қуёш элементларини ишлаб чиқиш муҳим вазифалардан бири ҳисобланади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2022 йил 28 январдаги ПФ-60-сон «2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тараққиёт стратегияси тўғрисида»ги Фармони, 2020 йил 10 июлдаги ПҚ-4779-сон «Иқтисодий энергия самарадорлигини ошириш ва мавжуд ресурсларни жалб этиш орқали иқтисодий тармоқларининг ёқилғи-энергетика

¹Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2022 йил 28 январдаги ПФ-60-сон “2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тарққиёт стратегияси тўғрисида”ги Фармони.

маҳсулотларига қарамлигини камайтиришга доир қўшимча чора-тадбирлар тўғрисида»², 2021 йил 9 апрелдаги ПҚ-5063-сон «Ўзбекистон Республикасида қайта тикланувчи ва водород энергетикасини ривожлантириш чора-тадбирлари тўғрисида»³ 2018 йил 17 июлидаги ПҚ-3855-сонли «Илмий ва илмий-техникавий фаолият натижаларини тижоратлаштириш самарадорлигини ошириш бўйича қўшимча чора-тадбирлар тўғрисида»⁴, 2018 йил 6 августдаги ПҚ-3899-сонли «Илмий ва инновацион фаолиятни интеграциялаш тизимининг самарадорлигини ошириш бўйича чора-тадбирлар тўғрисида»⁵, 2021 йил 19 мартдаги ПҚ-5032-сонли «Физика соҳасидаги таълим сифатини ошириш ва илмий тадқиқотларни ривожлантириш чора-тадбирлари тўғрисида»⁶ ги қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг Ўзбекистон Республикасида фан ва технологияни ривожланишнинг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялар ривожланишининг III. «Энергия, энергия ресурсларини тежаш, транспорт, машинасозлик ва асбобсозлик; замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника, электрон асбобсозликни ривожлантириш» устувор йўналишларига мувофиқ бажарилган.

Муаммонинг ўрганганлик даражаси. Комплексларнинг шаклланишини, нанокластерлар ва уларни ўраб турган матрица материалнинг атомлари ўртасидаги ўзаро таъсирнинг ўзига хос хусусиятларини, шунингдек, материалнинг оптик ва электрофизик хусусиятларига таъсирини ўрганиш масалаларига оид илмий тадқиқотлар жаҳоннинг илғор мамлакатларидаги илмий тадқиқот марказлари ва университетларида олиб борилмоқда. Хусусан, Г.В.Людвиг, Ҳ.Ҳ.Водбурий, Р.О.Карлсон (АҚШ), Ҳ.Стумпел, Д.Сенк, Ж.С.Шварте (Германия) Ҳ.Накашима, К.Ҳашимото (Япония), В.И.Фистуль, Б.И.Болтакс, М.Г.Мильвидский, А.А.Таскин, Е.Г.Тишковский, А.Н.Лодыгин, В.И.Таланин, Р.Бюб, Р.Бургер (Россия) томонидан экспериментал тадқиқотларда диффузия ходисаси орқали кремнийга киришма атомлари киритилгандан кейин материалнинг оптик ва электрофизик хусусиятларига таъсири натижасида кремний панжарасида комплекслар ҳосил бўлиши кузатилди ва бу ходисаларни ўрганиш такомиллаштириб борилмоқда.

Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси академиклари А.Т. Мамадалимов, М.К. Баҳодирхонов ва уларнинг шогирдлари О, S, Se, Те шунингдек, Mn атомлари ва бошқа киришма атомлар билан легирланган кремнийнинг фотоэлектрик, магнит ва оптик хусусиятларини ўрганганлар. Шу билан бирга, академик Р.А. Мўминов ва унинг шогирдлари кремнийда заряд ташувчиларни мультиэкситон генерация механизмларини ўрганганлар.

² <https://lex.uz/docs/4890081>

³ <https://lex.uz/docs/5362032>

⁴ <https://lex.uz/docs/3823583>.

⁵ <https://lex.uz/docs/3853858>.

⁶ <https://lex.uz/docs/5338558>.

Академик М.С. Саидов, профессор И.Г. Отабоев ва Н.А. Матчанов киришмаларни кремний-германий қотишмаларига паст ҳароратда диффузия қилиш технологиясини такомиллаштирганлар, шунингдек, А.З. Раҳматов оптималлаштирилган параметрларга эга катта қувватли диодларини ишлаб чиқаришда қўлланиладиган янги кассетали киришма атомларни диффузия қилиш усулини таклиф қилган.

Шу билан бирга, асосий легирловчи киришма атомларнинг кремнийдаги диффузия параметрлари ва технологик шароитлари ўртасидаги боғлиқлиги ҳамда киришма атомларнинг нанокластерларини кремнийнинг электрофизик ва фотоэлектрик хусусиятларига комплекс таъсири етарли даражада ўрганилмаган.

Диссертация мавзусининг бажарилган олий таълим муассасаси илмий тадқиқот ишлари билан боғлиқлиги. Диссертация иши Тошкент давлат техника университетининг ОТ-Ф2-55 тартиб рақамли «Янги функционал имкониятларга эга наноматериалларнинг янги синфи сифатидаги киришма атомлари нанокластерларининг шаклланиши негизида ҳажмий структуралашган кремний олишнинг илмий асосларини ишлаб чиқиш» мавзусидаги (2017-2020 йй.) ҳамда Тошкент давлат техника университетининг ОТ-Ф2-50 тартиб рақамли «Кремний панжарасида $A^{III}B^V$ ва $A^{II}B^{VI}$ яримўтказгич бирикмаларининг элементар ячейкалари шаклланишининг илмий асосларини ишлаб чиқиш - фотоэнергетика ва фотоника учун истиқболли материаллар олишдаги янги ёндашув» (2017-2020 йй.) мавзусидаги фундаментал тадқиқот грантлари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади марганец атомларини монокристалл кремний панжарасида VI гуруҳ элементлари (O, S, Se, Te) билан ўзаро таъсирини тадқиқ қилишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

Mn ва VI гуруҳ элементларини монокристалл кремнийдаги комплексларини ҳосил қилишнинг оптимал диффузион ва технологик шароитларини аниқлаш;

Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe ва Si_2MnTe комплексларга эга бўлган кремнийнинг электрофизик хоссаларини ўрганиш;

Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe ва Si_2MnTe комплексларга эга бўлган кремнийнинг фотоэлектрик ва оптик хоссаларини ўрганиш;

кремний кристалл панжарасида Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe ва Si_2MnTe комплекслари ҳосил бўлишининг физик механизмларини тушунтириш.

Тадқиқот объекти сифатида кристаллографик йўналиши [111] бўлган монокристалл кремнийда бор ёки фосфор киришма атомларининг концентрацияси (N_B , $N_P=10^{13}\div 10^{16}$ см⁻³) бўлган КДБ ва КЭФ пластиналари танлаб олинган. Легирлаш учун киришма атомлар сифатида – кимёвий ўта тоза олтингугурт, селен, теллур ва марганец элементлари танланган.

Тадқиқот предмети олтингугурт, селен, теллур ва марганец атомлари билан легирланган кремнийли тузилмаларнинг электрофизик, фотоэлектрик ва оптик хусусиятлари.

Тадқиқотнинг усуллари. Ишни бажаришда микрондли таҳлил, сканерловчи электрон микроскоп, ИҚ – микроскоп, ИҚ – спектрометр, спектрофотометр, рентген фазали таҳлил каби замонавий усулларидан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

Mn ва VI гуруҳ атомларининг монокристалл кремнийдаги комплексларини ҳосил қилишнинг оптимал диффузион ва технологик шароитлари тажрибалар натижаси асосида аниқланган. Энг самарали ҳарорат қийматлари кислород ва марганец атомлари учун – $T=1300\text{ }^{\circ}\text{C}$, олтингугурт ва марганец учун – $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$, селен ва марганец учун – $T=820\text{ }^{\circ}\text{C}$, теллур ва марганец учун – $T=650\text{ }^{\circ}\text{C}$ эканлиги аниқланган;

кремний панжарасида марганец ва VI гуруҳ атомларини ўз ичига олган, Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe ва Si_2MnTe кўринишидаги янги комплексларни ҳосил қилиш имконияти кўрсатиб берилган;

илк марта Si_2MnSe комплекслари ҳосил қилинган монокристалл кремний асосида яратилган қуёш элементларида салт юриш кучланиши $U_{\text{с}ю}\sim 12\%$ ва қисқа туташув токи $J_{\text{к}т}\sim 22\%$ га ошиши аниқланган;

кремний кристалл панжарасида Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe ва Si_2MnTe комплекслари ҳосил бўлишининг физикавий механизмлари яратилган. Mn ва VI гуруҳ атомлари учун Гиббс энергия коэффициенти $\beta=(2\div 3)\cdot 10^{-3}\text{ эВ}/^{\circ}\text{C}$ га тенглиги аниқланган;

илк марта экспериментал аниқланган комплекслар концентрацияси асосида кремний панжарасида Mn ва VI гуруҳ атомлари орасидаги боғланиш энергиялари ҳисобланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

Mn атомлари ва VI гуруҳ элементларининг монокристалл кремнийдаги комплексларини ҳосил қилиш учун легирлашнинг оптимал диффузион ва технологик шароитлари тажрибалар асосида аниқланган;

Кислород ва марганец атомлари учун $T=1300\text{ }^{\circ}\text{C}$ да, олтингугурт ва марганец $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ да, селен ва марганец $T=820\text{ }^{\circ}\text{C}$ да, теллур ва марганец $T=650\text{ }^{\circ}\text{C}$ да максимал концентрацияда ҳосил бўлиши кўрсатиб берилган.

Олинган натижаларининг ишончлилиги замонавий ўлчаш воситалари ва тадқиқот усуллари қўлланилганлиги, экспериментал ва ҳисобланган маълумотларни бошқа муаллифларнинг натижалари билан мувофиқлиги, шунингдек, олинган натижаларни конденсирланган ҳолат физикаси ва технологиясининг замонавий физик моделлари асосида ижодий тавсифланганлиги ҳамда тадқиқот объектининг тўғри танланганлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти:

Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти, ҳажмий нано ва микротузилмали яримўтказгич материалларни олишда янгича ёндошувни қўллаган ҳолда кремний материалида бинар комплексларини шакллантиришнинг физик асосларини сезиларли тарзда кенгайтирилганлиги, шунингдек, кремний панжарасида Mn ва VI гуруҳ атомлари орасидаги

комплекслар ҳосил бўлишининг физик механизмлари очиб берилганлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти марганец ва VI гуруҳ атомлари комплексларини ҳосил қилишнинг оптимал диффузия технологиясини арзон ва юқори самарадорликка эга марганец ва VI гуруҳ атомлари билан легирланган кремнийли қуёш элементларини ишлаб чиқаришда қўлланилиши билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Кремний панжарасидаги марганец ва VI гуруҳ киришма атомларининг ўзаро таъсирлашувини тадқиқ қилиш бўйича олинган натижалар асосида:

«FOTON» акциядорлик жамияти томонидан кремний асосида юқори сезувчанликка эга фотодиодлар ишлаб чиқаришда эрозиясиз технология ва марганец атомлари ва VI гуруҳ элементлари атомлари билан легирланган кремний материалларини олиш учун ишлаб чиқилган янги икки босқичли диффузион технология жорий этилган ва ишлаб чиқаришда қўлланилган. («UZELTEXSANOAT» акциядорлик жамиятининг 2021 йил 29 декабрдаги 04-3/2817-сон маълумотномаси). Тадқиқот ишининг илмий натижаларини қўллаш «FOTON» АЖ томонидан кремний асосида ишлаб чиқарилган диодлар ва яримўтказгич қурилмаларнинг сезгирлигини ошириш имконини берган. Натижада илмий натижаларни эффективлиги 17÷19 % гача бўлган ФВП ва ФВМ (фотоволтаик панеллар ва модуллар) ишлаб чиқариш учун қўллаш тавсия этилган;

Кремний панжарасидаги марганец атомлари ва VI гуруҳ элементлари асосида Si_2MnB^{VI} турдаги комплексларни олиш учун ишлаб чиқилган технология «FOTON» акциядорлик жамиятида қўлланилган («UZELTEXSANOAT» акциядорлик жамиятининг 2021 йил 29 декабрдаги 04-3/2817-сон маълумотномаси). Олинган илмий натижаларни қўллаш асосида кремний асосидаги қуёш элементларининг фотосезгирлик спектрал соҳасини кенгайтиришга эришилган. Натижада ишлаб чиқилган технология эмиттер сирт қаршилигини 12÷14 % га камайтириш ва самарадорлиги юқори (19÷20 %) қуёш батареяларини ишлаб чиқариш учун қўлланилган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация ишида олинган илмий натижалар 8 та халқаро, 6 та республика миқёсида ўтказилган илмий-амалий конференцияларда маъруза ва муҳокама қилинган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Диссертация мавзуси бўйича жами 19 та илмий ишлар, шулардан 5 таси Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси томонидан тавсия этилган илмий журналларда, шу жумладан 3 таси республика ва 2 таси хорижий (Scopus маълумотлар базасида индексланган) журналларда чоп этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация кириш, тўртта боб, хулоса, 92 та адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 28 та расм, 21 та жадвални ўз ичига олган ҳолда, 106 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурияти асосланган, республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, муаммонинг ўрганилганлик даражаси очиб берилган, тадқиқотнинг мақсад ва вазифалари, объекти, предмети ва ўлчаш усуллари келтирилган, ишнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, тадқиқот натижаларини амалиётга жорий қилиш, ишнинг апробацияси, нашр этилган илмий ишлар, шунингдек диссертациянинг хажми ва тузилиши ҳақида қисқача маълумотлар келтирилган.

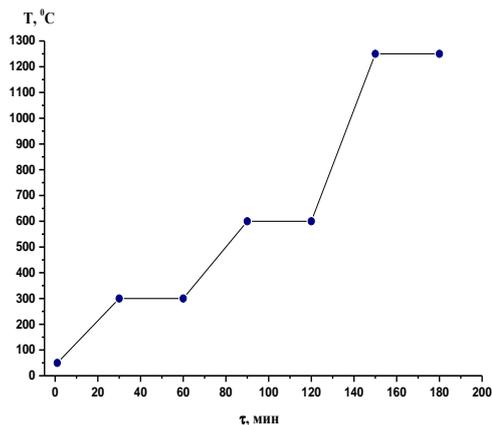
«Марганец атомларининг кремний панжарасидаги VI гуруҳ элемент атомлари билан ўзаро таъсирини ўрганишнинг ҳозирги ҳолати ва истиқболлари» деб номланган биринчи бобда, нанокластерларга эга яримўтказгич материалларни олишнинг ҳозирги ҳолати ва сўнги фан ютуқлари таҳлил қилинган. Мавжуд назарий ва тажриба маълумотларни таҳлил қилиш асосида диссертация ишининг вазифалари шакллантирилган.

«Киришма атомларнинг комплексларига эга кремний олиш технологияси ва экспериментал усуллар» деб номланган иккинчи бобда, кремний панжарасидаги марганец атомлари ва VI гуруҳ элементлари комплексларини олишнинг диффузион технологиясининг ўзига хос хусусиятлари ўрганилган.

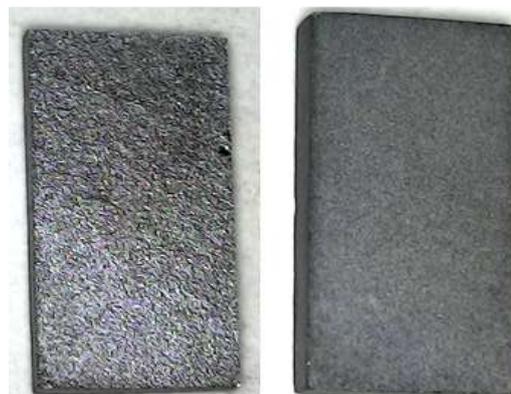
Киришма атомларининг бир-бири билан ёки кристалл панжарадаги нуқсонлар билан ўзаро таъсири, айниқса, яримўтказгичларда киришма атомларидан ташкил топган комплексларини ҳосил қилиш учун оптимал термодинамик шароитларни аниқлаш, уларнинг концентрацияси ва параметрларини назорат қилиш муҳим илмий тадқиқот ҳисобланади. Наноўлчамдаги тузилмаларни шакллантиришда мавжуд бўлган анча мураккаб усулларида фарқли, кремний кристалл панжарасида киришма атомларнинг наноконкомплексларини яратиш бир қатор афзалликларга эга, яъни кристаллнинг бутун ҳажмида наноўлчамдаги тузилмаларни шакллантириш имконияти мавжуд. Шу муносабат билан кремнийга киришма атомларни легирлашнинг янги усулини таклиф қилинди, бу усул “паст ҳароратли ва босқичма-босқич” деб номланди.

Кремнийни S, Se, Te киришма атомлар билан легирлашда киришмаларнинг ҳажмда ва сиртдаги концентрациясини ошириш учун янгидан яратилган “паст ҳароратли босқичма-босқич” технология кўлланилган (1-расм).

Ушбу яратилган технологиядан фойдаланилганда кремний сиртида деярли эрозия бўлмаслиги аниқланди (2-расм).



1-расм. Паст ҳароратли босқичма-босқич диффузион легирлашда ҳарорат ва вақтнинг технологик режимлари.



2-расм. Ишлаб чиқилган янги технология бўйича VI гуруҳ элементлари билан легирланган Si намуналар юзаси (олд ва орқа томонлари).

Диффузия усули билан олинган нанотузилмаларнинг оптик хусусиятларини ўрганиш учун спектрофотометрик усулни қўллаш имкониятлари баҳоланган.

«Кремнийдаги марганец атомларининг VI гуруҳ атомлари билан ўзаро таъсири» деб номланган учинчи бобда, марганец атомларининг кремний панжарасидаги VI гуруҳ атомлари билан ўзаро таъсири, Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe , Si_2MnTe комплекслар ҳосил бўлишини ўрганиш натижалари келтирилган ва оптимал технологик шароитлар аниқланган.

1. Бошланғич материал сифатида, Чохралский усулида (I гуруҳ) ўстирилган ва тигелсиз зонали эритиш усули (II гуруҳ) билан олинган $\rho = 5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ (КДБ-5 маркали) солиштирма қаршиликли монокристал p -тур кремний ишлатилган. Бу намуналарда кислород концентрацияси мос равишда $N_{\text{O}_2} = (5\div 6) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ва $N_{\text{O}_2} \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ бўлган. Марганец киришма атомларининг диффузияси кварц ампулаларида газ фазасида амалга оширилган. Диффузия $T = 1100\div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ ҳарорат оралиғида $\Delta T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ ошириш билан, $t = 1$ соат давомида олиб борилган.

Диффузия ҳарорати $T = 1225\div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ оралиғида ортиши билан электр ўтказувчанликнинг тури тесқари бўлиши (I гуруҳ), яъни намуналар бошланғич (p -турдаги) ўтказувчанликни олиши ва уларнинг қаршилигини камайиши аниқланган. $T = 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ да намуналар дастлабки намуналар билан бир хил электрофизик параметрларга, яъни, p -турдаги ва қаршилиги $\rho = 5\div 7 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ га тенг бўлди (1-жадвал).

Бу маълумотлар, диффузия ҳарорати $T = 1175\div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ оралиғида бўлганда электрфаол марганец атомларининг концентрациясини камайиши ва $T = 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ ҳароратда уларнинг сони материалдаги бошланғич бор атомлари концентрациясидан сезиларли даражада кам бўлиб қолиши аниқланди.

Марганец атомлари концентрациясининг бундай ўзгариши кислород ва марганец атомлари ўртасида ион-ковалент боғланиш табиатга эга бўлган электронейтрал комплексларнинг шаклланиши билан боғлиқ деб тахмин қилинди.

Кремнийда Si_2MnO комплексларини ҳосил қилиш учун диффузиянинг термодинамик шароитлари тажриба натижалари асосида аниқланди, бунда энг самарали комплекс ҳосил бўлиш ҳарорати $T=1300\text{ }^\circ\text{C}$ га тенг бўлди. Олинган тажриба натижаларидан фойдаланиб, MnO комплексларнинг концентрацияси ҳисобланди ва у $N_{\text{MnO}} \sim 4 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-3}$ га тенг бўлди.

1-жадвал.

$T_{\text{diff}}=1300\text{ }^\circ\text{C}$ ҳароратда $t=1$ соат давомида марганец атомлари билан легирланган намуналарнинг электрофизик параметрлари

Намуналар	ЭЎ тури	Солиштирама қаршилиқ, ρ , Ом·см	Ток ташувчини ҳаракатчанлиги, μ , $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	Ток ташувчини концентрацияси n, p , см^{-3}
Si	p	5	275	$4,5 \cdot 10^{15}$
Si<B, Mn>	n	$(1,2 \div 1,5) \cdot 10^3$	1100	$(3,7 \div 4,7) \cdot 10^{12}$
Si<B,O>	p	5,9	221	$4,8 \cdot 10^{15}$
Si<B, O, Mn>	p	$5 \div 7$	$350 \div 370$	$(2,5 \div 3,4) \cdot 10^{15}$

Такидлаш керакки, II гуруҳ намуналари тигелсиз зонали эритиш усули билан олинган кремнийга $T=1200 \div 1300\text{ }^\circ\text{C}$ диффузия ҳарорати оралиғида киритилганда намуналар n -турга эга бўлиб, диффузия ҳароратининг ошиши билан қаршилиги бироз ортди.

2. Марганец ва олтингугурт киришма атомларининг диффузияси $T_{\text{diff}} = 1100\text{ }^\circ\text{C}$ да $t = 40$ мин давомида амалга оширилиб, Si<B, Mn>, Si<B,S> Si<B, S, Mn> намуналар олинди (2-расм). Марганец ва олтингугурт атомларининг $T=1100\text{ }^\circ\text{C}$ ҳароратдаги диффузияси натижасида қаршилиги $\rho=(4 \div 7)$ Ом·см бўлган p -турдаги материал олинди, яъни намуналар деярли ўзларининг дастлабки электрофизик параметрларига қайтди. Натижада, киритилган олтингугурт ва марганец атомлари электр фаоллигини йўқотди.

2-жадвал.

$T_{\text{diff}} = 1100\text{ }^\circ\text{C}$ ҳароратда $t=0,5$ соат давомида марганец ва олтингугурт атомлари билан легирланган намуналарнинг электрофизик параметрлари

Намуналар	ЭЎ, тури	Солиштирама қаршилиқ, ρ , Ом·см	Ток ташувчиларни ҳаракатчанлиги, μ , $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	Ток ташувчиларни концентрацияси n, p , см^{-3}
Si	p	5	275	$4,5 \cdot 10^{15}$
Si<B, Mn>	n	$4 \cdot 10^4$	1120	$1,4 \cdot 10^{11}$
Si<B,S>	n	5,75	810	$1,3 \cdot 10^{15}$
Si<B, S, Mn>	p	$4 \div 7$	$227 \div 359$	$(3,9 \div 4,4) \cdot 10^{15}$

Шуларга асосланиб, марганец атомларини кремнийга диффузиясида олтингугурт ва марганец атомлари ўртасида "кимёвий" ўзаро таъсир содир бўлади деб фараз қилиш мумкин. Бунда S^{++}Mn^- электронейтрал молекула ҳосил бўлиши учун $T=1100\text{ }^\circ\text{C}$ оптимал ҳарорат эканлиги аниқланди. Юқори

хароратда термик ишлов беришда S ва Mn атомлари орасидаги боғланишлар бузилди ва улар оддий донор киришма атомлар сифатида намоён бўлиши аниқланди.

Si_2MnS турдаги комплексларни ҳосил қилиш учун оптимал ҳарорат $T=1100$ °C бўлиши кераклиги аниқланди. Олинган тажриба натижаларидан фойдаланиб, MnS турдаги комплексларнинг концентрацияси ҳисобланди ва у $N_{\text{MnS}} \sim 4 \cdot 10^{15}$ см⁻³ ни ташкил этди.

3. Бошланғич материал сифатида $\rho=0.5$ Ом·см ($N_{\text{B}}=4 \cdot 10^{16}$ см⁻³) бўлган монокристалл *p*-турдаги кремний танланди. Марганец атомларининг диффузияси $T=1160$ °C да $t=30$ минут давомида кварц ампулаларида «паст ҳароратли босқичма-босқич» диффузия усулида амалга оширилди. Кейин Se атомларини диффузияси $T=1200$ °C да $t=30$ дақиқа давомида амалга оширилди. Натижада *p-n* кўринишдаги тузилмалар, яъни фотоэлементлар олинди. MnSe молекуласидаги нисбатан юқори боғланиш энергияси ва марганецнинг юқори диффузия коэффицентини ҳисобга олган ҳолда, кўшимча термик ишлов бериш (ҚТИБ) ҳарорати $T = 820$ °C да танланди. Кўшимча термик ишлов беришдан сўнг, фотоэлементининг (ФЭ) салт юриш кучланиши ($U_{\text{сью}}$) ва қисқа туташув токи зичлиги ($J_{\text{қт}}$) ўлчанди. Si<B, Mn, Se> фотоэлементларида $J_{\text{қт}}$ қиймати Si<B, Se> ФЭ га нисбатан 22% га ошди, $U_{\text{сью}}$ қиймати эса 427 мВ дан 480 мВ га, яъни 12 % га ортди (3-жадвал). Термик ишлов беришдан сўнг ФЭ ларни параметрларининг Si<B,Se> ошиши селен атомларини кремнийдаги рекомбинацион киришмаларни геттерлаш хусусияти билан тушунтирилди.

3-жадвал.

Кўёш элементларининг $T=820$ °C ҳароратда кўшимча термик ишлов беришдан кейинги электрофизик параметрлари

Намуналар	$J_{\text{қт}}, \text{mA/cm}^2$	$U_{\text{сью}}, \text{mV}$	$P_{\text{тик}}, \text{mW/cm}^2$
Si<B, Se>	18	427	7,686
Si<B, Mn, Se>	22	480	10,560
Si<B, Mn, Se> ФЭ параметрларини Si<B, Se> ФЭ га нисбатан ўзгариши	+22%	+12 %	+37.4%

Диффузия жараёнидан сўнг селен атомларининг бундай хусусиятлари деярли намоён бўлмайди, чунки диффузиядан кейин тез совутиш сабабли электрофаол бўлишга улгурмайди. Узоқ муддатли кўшимча термик ишлов бериш комплекслар ҳосил бўлиш жараёнини фаоллаштиради ва бу назоратсиз киришмалар ва нуқтали нуқсонларнинг геттерланишига олиб келди.

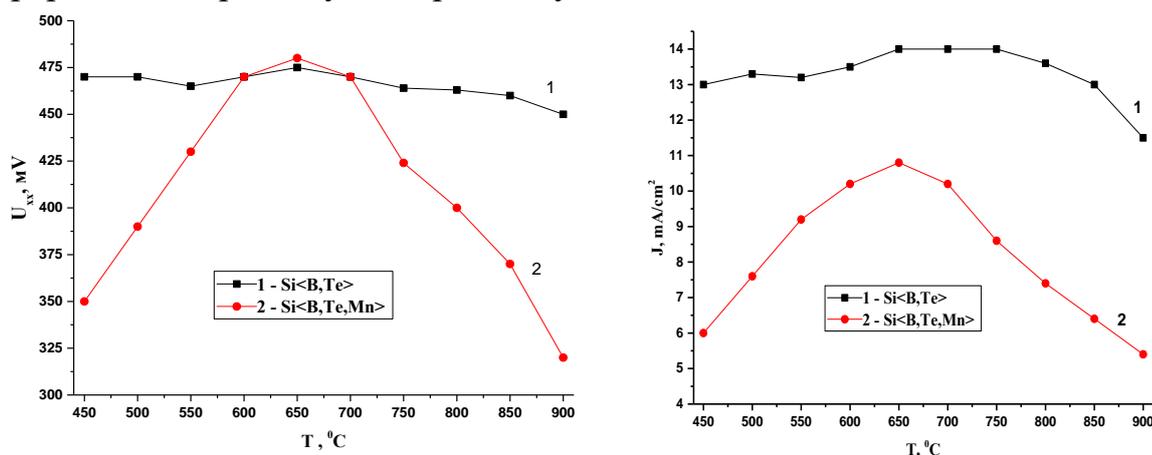
Демак, Si_2MnSe турдаги комплексларни ҳосил бўлишининг технологик оптимал шароитлари аниқланди - селен ва марганец киришма атомларининг диффузия ҳарорати $T=1160$ °C, кўшимча термик ишлов бериш (комплекс ҳосил бўлиш) ҳарорати $T=820$ °C ни ташкил этди. Диффузия ва кўшимча термик ишлов беришдан сўнг ФЭ параметрларини $U_{\text{сью}}$ - 12% га, $J_{\text{қт}}$ - 22% га, $P_{\text{тик}}$ - 37,4% га ошгани аниқланди.

4. Бошланғич материал сифатида КДБ-0,5 танланди. Теллур $T=1250$ °C ва марганец $T=1100$ °C ҳароратда диффузия қилинди. Натижада *p-n* ўтиш, яъни ФЭ олинди. Кўшимча термик ишлов бериш натижасида, марганец киришма

атомлари билан легирланган ФЭ ларнинг асосий параметрлари ёмонлашиши аниқланди (3-расм). Шу билан бирга, ФЭ параметрларнинг ўзгариши қўшимча термик ишлов бериш ҳароратига боғлиқ бўлиб, бу қўшимча термик ишлов бериш жараёнида марганец атомларининг ҳолатини ўзгаришини кўрсатади.

$\text{Si}\langle\text{B,Te}\rangle$ ва $\text{Si}\langle\text{B, Te,Mn}\rangle$ ФЭ ларнинг параметрлари $T_{\text{ann}} = 450\div 900$ °C ҳарорат оралиғида қўшимча термик ишлов беришда сезиларли даражада ўзгариши аниқланди (3-расм). $\text{Si}\langle\text{B,Te,Mn}\rangle$ ФЭ параметрларининг максимал қиймати $T=650$ °C ҳароратда кузатилиши аниқланди.

Демак, $T=650$ °C ҳароратда теллур-марганец комплексларининг интенсив ҳосил бўлиши, марганец киришма атомларининг ФЭ параметрларига “зарарли” таъсирини сусайтириши мумкин экан.

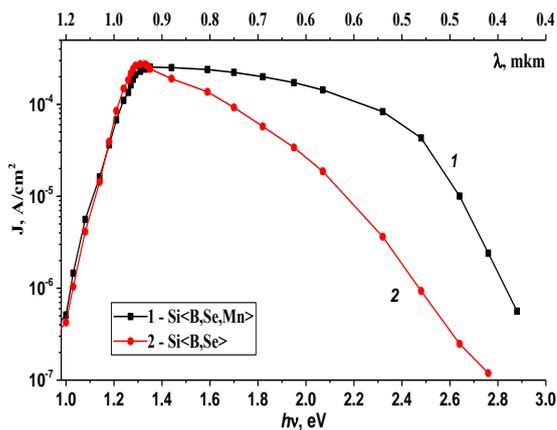


3-расм. Фотоэлементларнинг U_{ox} ва J_{km} параметрларини қўшимча термик ишлов бериш ҳароратига боғлиқлиги.

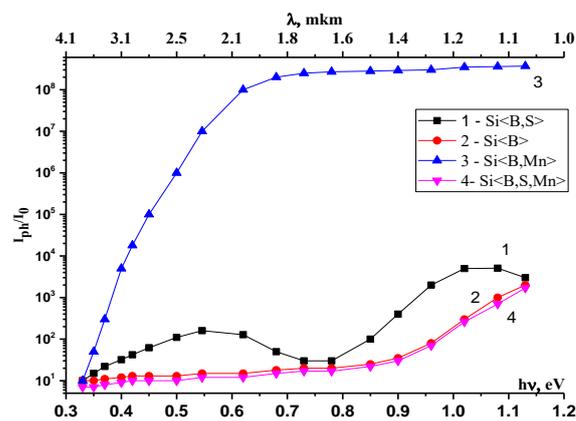
Si_2MnTe турдаги комплексларни ҳосил қилиш учун оптимал диффузия ҳарорати $T=1160$ °C ва термик ишлов бериш ҳарорати $T=650$ °C га тенг эканлиги аниқланди.

“Кремнийдаги VI гуруҳ атомлари билан марганец атомлари комплексларининг оптик хоссалари” деб номланган диссертациянинг тўртинчи бобида киришма атомларни турли комплексларга эга кремнийнинг оптик хоссаларини илмий тадқиқот натижалари келтирилган. Марганец атомларнинг VI гуруҳ атомлари билан комплекслар ҳосил қилишининг физик механизмлари очиб берилган. Гиббс энергиялари ва бу комплексларнинг боғланиш энергиялари ҳисоблаб чиқилган.

1. Селен ва марганец атомлари билан легирланган кремний асосидаги ФЭ ларда, $h\nu=1,1\div 2,8$ эВ ($\lambda=1,1\div 0,44$ мкм) спектр соҳасида, назорат ФЭ га нисбатан J_{km} қийматининг сезиларли ўсиши кузатилди ва унинг қиймати $h\nu = 1,3\div 2,5$ эВ спектр соҳасида деярли ўзгармасдан қолиши аниқланди (4-расм).



4-расм. Si <Mn, Se> ва Si<Se> ФЭ ларни $J_{кт}$ қийматининг спектрал боғлиқлиги.



5-расм. Si <B, S>, Si, Si <B, Mn>, Si <B, Mn, S> намуналарни фотоўтказувчанлигининг спектрал боғлиқлиги (80 K да).

Ушбу физик ҳолат сирт юзаси рекомбинациясининг камайиши билан изоҳланди. Сирт рекомбинациясининг сезиларли даражада камайиши диффузия жараёнида вужудга келадиган мусбат зарядланган марганец атомларининг концентрация градиентини пайдо бўлиши туфайли кузатилиши, бу эса ФЭ нинг сирт юзасидан (n^+ қатлам) ковакларни ҳаракат оқимиға тескари электр майдонининг пайдо бўлишиға олиб келиши асосида тушунтирилди.

Натижалар Mn ва Se атомлари билан легирлаш кремний ФЭ ларининг спектрал сезгирлигини кўринадиган ёруғликдаги самарадорлигини оширишини кўрсатди (4-расм). Марганец ва селен атомлари билан легирлаш ФЭ ларни $J_{кт}$ нинг спектрал сезгирлигини яхшилашга имкон бериши аниқланди.

2. Параметрлари 2-жадвалда келтирилган намуналар фотоўтказувчанлигининг спектрал сезгирлиги суяқ азот ҳароратида (80K) ўлчанди (5-расм). Расмдан (1 ва 3 эгри чизиклар) кўриниб турибдики, кремнийдаги S ва Mn киришма атомларининг донор энергетик сатҳлари билан боғлиқ фотосезгирлик Si<S> ва Si<Mn> намуналарида аниқ намоён бўлди. Бироқ, Si <B, S, Mn> намуналарида (4 эгри чизик) S ва Mn киришма атомларининг энергетик сатҳларига мос фотоўтказувчанлик аниқланмади. Бу кремний панжарасида электронейтрал $S^{++}Mn^{-}$ молекулаларининг ҳосил бўлиши билан тушунтирилди.

Шундай қилиб, кремний панжарасида янги бинар элементар ячейкаларининг шаклланишиға олиб келадиган, Mn ва VI гуруҳ элементларининг атомлари ўртасида ион-ковалент боғланишға эга бўлган, электронейтрал молекулалар ҳосил бўлиши тажриба натижаларининг таҳлили асосида аниқланди.

3. Марганец атомларининг диффузиясидан сўнг кремнийдаги (намуна параметрлари 1-жадвалда келтирилган) оптик фаол кислород атомларининг концентрацияси ФСМ-1202 Фуре-спектрометри билан (9 мкм спектрал соҳада) ўлчанди (6-расм).

Кислород атомларининг концентрацияси қуйидагича ҳисобланган:

1) Mn билан легирланган намуналар учун - Si<Mn>

$$N_o^{OPT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$$

2) Назорат намуналари учун - Si <назорат>

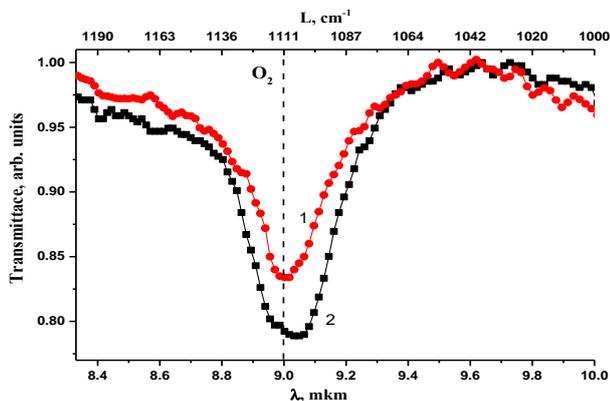
$$N_o^{OPT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 3.15 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$$

3) Si <Mn> ва назорат намуналарида N_o^{OPT} нинг нисбий ўзгариши:

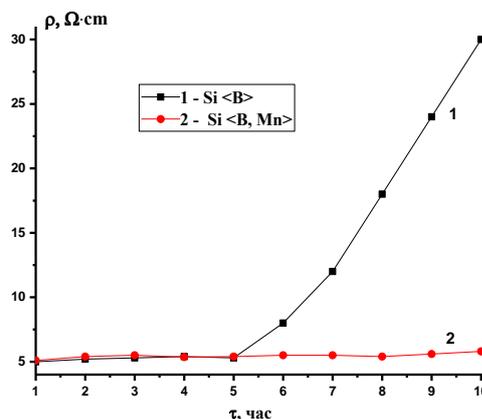
$$(N_o^{OPT(\text{назорат})} - N_o^{OPT(\text{Mn})}) / N_o^{OPT(\text{назорат})} = (3.15 \cdot 10^{17} - 3 \cdot 10^{17}) / 3.15 \cdot 10^{17} = 0.05.$$

Кремнийни Mn киришма атомлари билан легирлаш оптик фаол кислород атомларининг концентрациясини 5% га, яъни, $N_o^{OPT} = 1,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ гача камайишига олиб келди. Кислород концентрациясининг ўзгариши Mn атомларининг шу диффузия ҳароратидаги эрувчанлиги $N \sim (1,5 \div 2) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ га мос тушди.

Ушбу натижаларни Mn атомларининг оптик фаол кислород атомлари билан ўзаро таъсири ҳисобига деб изоҳлаш мумкин, аммо, кремнийда Mn атомларининг эрувчанлиги кичик бўлганлиги туфайли таъсири унчалик сезилмайди.

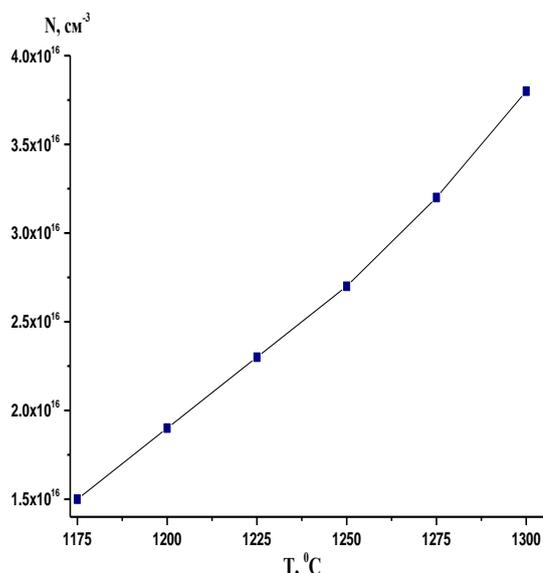


6-расм. Намуналар ёруғлик ўтказувчанлигининг нурланишнинг тўлқин узунлигига боғлиқлиги. 1 - Si<Mn>, 2 - назорат намунаси.

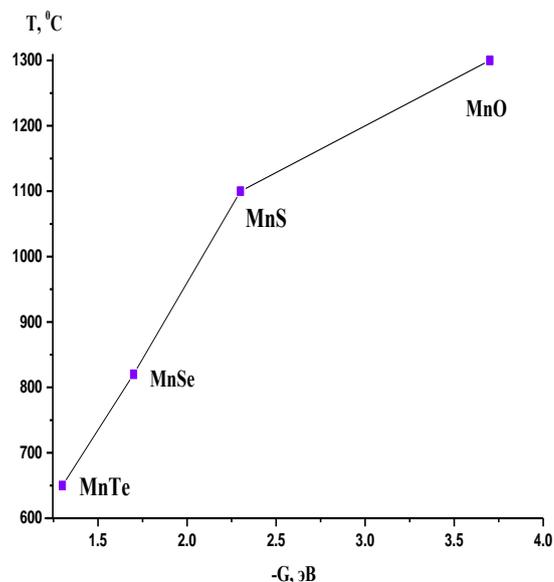


7-расм. $T=450 \div 500 \text{ }^\circ\text{C}$ ҳароратда термик ишлов бериш вақтининг солиштирма қаршиликка таъсири, 1 - назорат намуналари, 2 - Mn билан легирланган намуналар.

4. Адабиётлардан маълумки, кремнийга $T=450 \div 500 \text{ }^\circ\text{C}$ ҳарорат оралиғида термик ишлов беришда термодонорларнинг максимал ҳосил бўлиши кузатилади. Шунинг учун бу ҳароратда ($t=1 \div 10$ соат давомида) термик ишлов бериш, $\rho=5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ бўлган p -турдаги намуналар ва $T=1300 \text{ }^\circ\text{C}$ да Mn киритилган намуналарнинг электрофизик параметрларига таъсири ўрганилди. Mn атомлари билан легирланган кремнийнинг электрофизик параметрлари - жадвалда кўрсатилган. Назорат намуналари сифатида Mn билан легирланмаган кремний материали ишлатилди. Назорат намуналарига, $t > 5$ соатдан ортиқ вақт давомида қўшимча термик ишлов беришда қаршиликнинг ошиши кузатилди, бу термодонорларнинг пайдо бўлишини кўрсатади. Шу билан бирга, марганец билан легирланган намуналарнинг электрофизик параметрлари деярли ўзгаришсиз қолди (7-расм).



8-расм. Si(O-Mn) комплексларининг концентрациясини ҳароратга боғлиқлиги.



9-расм. Комплекс ҳосил бўлиш ҳароратининг Гиббс энергиясига боғлиқлиги.

5. Si(O-Mn) комплексларининг концентрацияси, $T=1175\div 1300$ °C ҳарорат оралиғида Mn атомларининг эрувчанлиги билан диффузиядан сўнг олинган намуналардаги электрфаол Mn атомларининг концентрацияси ўртасидаги фарқдан аниқланди - $N=N_{Mn}^0-N_{Mn}^1$, бу ерда: N_{Mn}^0 - Mn атомларининг диффузия ҳароратидаги эрувчанлиги, N_{Mn}^1 - шу ҳароратдаги электрфаол Mn атомларининг концентрацияси. Компенсацияланган намуналар учун $N_{Mn}^1=p_0-p_1$, компенсацияланиш асосида ўтказувчанлик тури ўзгарган намуналар учун $N_{Mn}^1=p_0+n+f_1(E_1)+f_2(E_2)$, бунда: p_0 - дастлабки материалдаги коваклар концентрацияси, p_1 - компенсацияланган намунадаги коваклар концентрацияси, $f_1(E_1)$ - Mn нинг биринчи энергетик сатҳини тўлдириш эҳтимоллиги, $f_2(E_2)$ - Mn нинг иккинчи энергетик сатҳини тўлдириш эҳтимоллиги. Холл эффекти усули ва кремнийдаги Mn нинг энергетик сатҳлари ($E_1=E_C-0,27$ эВ, $E_2=E_C-0,5$ эВ) қийматларидан фойдаланган ҳолда нейтраллик тенгламасини ечиш йўли билан p_0 , p_1 , n , шунингдек $f_1(E_1)$, $f_2(E_2)$ нинг қийматлари аниқланди.

8-расмдан кўриниб турибдики, диффузия ҳарорати ортиши билан комплексларнинг концентрацияси ортди ва $T=1300$ °C да $N\sim(3\div 4)10^{16}$ см⁻³ га тенг бўлди. Бу концентрация Mn атомларининг шу ҳароратдаги эрувчанлигига яқин.

6. Маълумотларни таҳлил қилиб, комплексларнинг энг самарали ҳосил бўлиш ҳарорати ($T_{эфф}$, °C) билан мос келадиган кимёвий бирикмаларнинг термодинамик Гиббс энергияси (G_{298}^0) ўртасида боғлиқлик қонунияти мавжудлиги аниқланди (9-расм).

$$\frac{G_{298}^0 < MnO >}{T_{эффMnO}} = \frac{G_{298}^0 < MnS >}{T_{эффMnS}} = \frac{G_{298}^0 < MnSe >}{T_{эффMnSe}} = \frac{G_{298}^0 < MnTe >}{T_{эффMnTe}} = \beta .$$

Барча киришма атомлари комплекслар Гиббс энергиясининг, комплекслар энг самарали ҳосил бўлиш ҳароратига нисбати деярли бир хил

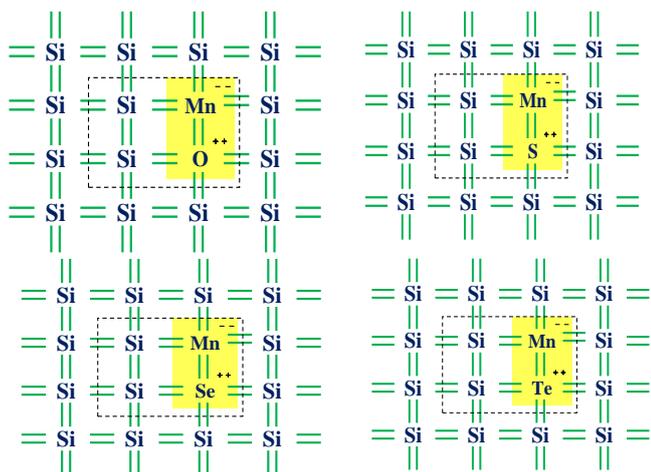
қийматга эга ($\beta = -(2 \div 3) \cdot 10^{-3}$ эВ/°С) бўлиши ва бу комплексларни вужудга келишидаги ҳосил бўлиш коэффициентлари тавсифлари аниқланди.

Комплексларнинг Гиббс энергияси билан самарали комплекс ҳосил бўлиш ҳарорати ўртасидаги боғлиқликнинг мавжудлиги Mn атомлари билан O, S, Se, Te комплексларининг кимёвий табиати мослигидан далолат беради. Бошқача қилиб айтганда, кремнийда VI гуруҳ элементларининг Mn атомлари билан ўзаро таъсири жараёнида бу элементларнинг алмашилиш марказлари билан Mn атомларининг алмашилиш маркази ўртасида электронейтрал кимёвий боғланган комплекслар ҳосил бўлиши кузатилди.

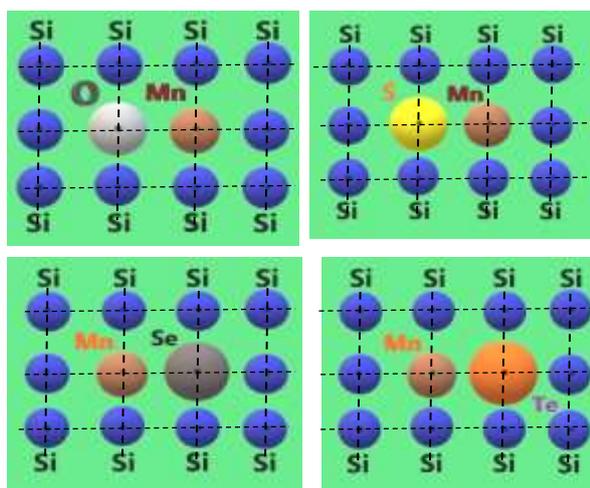
O, S, Se, Te элементлари билан олдиндан легирланган кремний намуналарни Mn атомлари билан легирлагандан сўнг, намуналарнинг электрофизик параметрлари – солиштира қаршилик, ҳаракатчанлик ва заряд ташувчиларнинг концентрацияси ўзгариши аниқланди. Mn атомлари билан легирлагандан кейин заряд ташувчилар концентрациясининг ўзгариши кремний панжарасидаги Mn ва VI гуруҳ элементларининг ўзаро таъсири натижасида ҳосил бўлади деб изоҳлаш мумкин.

7. Кремний панжарасида марганец ва VI гуруҳ элемент атомлари комплекслари тузилишининг физик модели берилди (10-расм).

Оптимал термодинамик шароитда Mn ва VI гуруҳ элементларининг атомларини ўзаро таъсири туфайли кремний панжарасида электронейтрал комплекслар ҳосил бўлиши кузатилди. Электр нейтрал комплексларнинг ҳосил бўлиши натижасида $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{O}^{++}$, $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{S}^{++}$, $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{Se}^{++}$ ва $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{Te}^{++}$ турдаги янги тетраэдрик элементар ячейкалар шаклланди. Бу элементар ячейкалар кремний панжарасининг тетраэдрик боғланишини бузмасдан панжара тугунларида жойлашади ва шу билан бирга тизимнинг янада қулай термодинамик ҳолатини таъминлайди.



10-расм. Кремний панжарасидаги $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{O}^{++}$, $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{S}^{++}$, $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{Se}^{++}$ ва $\text{Si}_2\text{Mn}^-\text{Te}^{++}$ комплексларининг тузилиши.



11-расм. Mn атомлари билан VI гуруҳ элементлари комплексларининг кремний панжараси тугунларида жойлашиши.

Mn атомлари ва VI гуруҳ элементларининг атомларидан ташкил топган комплексларнинг кремний панжараси тугунларида жойлашиши 11-расмда кўрсатилган. Ҳисобланган маълумотлар таҳлилига асосланиб, молекуляр комплексдаги атомлар орасидаги масофа қиймати ўзгаради деб тахмин қилиш

мумкин ва буни комплекс атрофида жойлашган кремний атомларининг таъсири билан изоҳлаш мумкин.

8. Физикавий моделни яратишда Mn ва VI гуруҳ элементларининг атомлари ўзаро ион боғланишда деб ҳисоблаб, уларнинг боғланиш энергиялари аниқланди.

Тажрибаларда аниқланган комплексларнинг концентрациясига (4-жадвал) асосланиб, VI гуруҳ элементларининг атомлари билан Mn атомларини боғланиш энергиялари (5-жадвал) Кулон ўзаро таъсири (1) ва Аррениус формуласи (2) ёрдамида ҳисобланди:

$$E_{MnVI} = \frac{4kq^2}{\epsilon r_{MnVI}} - \frac{4kq^2}{\epsilon r_{\infty}}, \quad (1)$$

$$E_a = kT \ln \left(\frac{N \cdot C_{MnVI}}{4C_{Mn} C_{VI}} \right). \quad (2)$$

4-жадвал.

Кремнийда Mn ва VI гуруҳ атомларининг ва уларнинг комплексларининг концентрациялари.

$T, ^\circ\text{C}$	C_{Mn}, cm^{-3}	C_O, cm^{-3}	C_{MnO}, cm^{-3}	N, cm^{-3}
1300	$2 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{17}$	$4 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{22}$
$T, ^\circ\text{C}$	C_{Mn}, cm^{-3}	C_S, cm^{-3}	C_{MnS}, cm^{-3}	N, cm^{-3}
1100	$1,5 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{16}$	$4 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^{22}$
$T, ^\circ\text{C}$	C_{Mn}, cm^{-3}	C_{Se}, cm^{-3}	C_{MnSe}, cm^{-3}	N, cm^{-3}
1250	$2 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{15}$	$2,5 \cdot 10^{22}$
$T, ^\circ\text{C}$	C_{Mn}, cm^{-3}	C_{Te}, cm^{-3}	C_{MnTe}, cm^{-3}	N, cm^{-3}
1250	$2 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{15}$	$2,5 \cdot 10^{22}$

Бунда: C_{Mn} – Mn атомларининг берилган диффузия ҳароратидаги эрувчанлиги, C_{VI} – VI гуруҳ элементларининг берилган диффузия ҳароратидаги эрувчанлиги, C_{MnVI} – Mn билан VI гуруҳ элементларининг атомлари ҳосил қилган комплексларини концентрацияси.

Шуни таъкидлаш керакки, VI гуруҳ элементларининг атомларини миқдори ошиб бориши билан комплекслардаги боғланиш энергиясининг миқдори камайиб бориш қонуниятини аниқланди (5-жадвал).

Кулон ўзаро таъсири асосида ҳисобланган комплексларни (Mn билан O, S, Se, Te) боғланиш энергиясини камайиб бориш қонуниятини (5-жадвал) Гиббс энергиясининг ўзгариш қонуниятига (9-расм) мос келди. Шунингдек, тажрибада аниқланган киришма атомларининг ва комплексларнинг концентрациясини қийматидан фойдаланиб ҳисобланган комплексларнинг боғланиш энергиялари қийматининг камайиб бориши ҳам шу қонуниятга мос келди (5-жадвал).

Кремний панжарасидаги Mn атомлари ва VI гуруҳ элементларининг атомлари орасидаги боғланиш энергиялари.

Бинар комплекслар	Кулон ўзаро таъсири асосида ҳисобланган боғланиш энергия E , эВ	Аррениус тенгламаси асосида ҳисобланган боғланиш энергия E , эВ
Si_2MnO	2,17	1,46
Si_2MnS	1,5	1,24
Si_2MnSe	1,39	1,09
Si_2MnTe	1,24	0,87

Тажриба маълумотлари ва назарий ҳисоблар таҳлилидан марганецнинг VI гуруҳ элементлари атомлари билан молекуляр комплекслар ҳосил бўлишининг физик модели асосли эканлиги тасдиқланди.

Марганец атомлари ва VI гуруҳ элементлари билан легирлаган кремнийнинг электрофизик параметрларида деярли ҳеч қандай ўзгаришлар бўлмайди, бу кремний асосида тайёрланган электрон қурилмаларнинг ишчи параметрларининг барқарорлигини оширишга имкон беради.

Хулоса ўрнида, диссертация ишимни бажаришда кўрсатган ҳар таърафлама ёрдами учун устозимиз академик М.К.Бахадирхановга, илмий раҳбарим профессор Х.М.Илиевга ва ТДТУ «Рақамли электроника ва микроэлектроника» кафедрасининг барча жамоасига раҳмат айтаман.

Х У Л О С А

Фалсафа доктори (PhD) диссертация “Кремний панжарасидаги марганец ва VI гуруҳ киришма атомларининг ўзаро таъсирлашуви” мавзуси буйича олинган илмий натижалар асосида қуйидаги хулосаларга келинди:

1. Кремнийни VI гуруҳ элементлари билан эрозиясиз легирлаш учун паст ҳароратли босқичма-босқич технология яратилди. Бу технологиядан фойдаланиб, диффузия амалга оширилганда кремний юзасида эрозия содир бўлмаслиги кўрсатилди.

2. Кремний панжарасида Si_2MnO турдаги комплексларни ҳосил қилиш учун Mn киришма атомлари учун диффузия ҳарорати аниқланди - $T=1300\text{ }^\circ\text{C}$, бу диффузия ҳароратида комплекслар жадаллик билан ҳосил бўлди. Олинган натижалардан фойдаланиб, MnO комплексларининг концентрацияси - $N_{\text{MnO}}\sim 4\cdot 10^{16}\text{ см}^{-3}$ га тенглиги аниқланди. Si_2MnS комплексларини ҳосил қилиш учун диффузия ҳарорати - $T=1100\text{ }^\circ\text{C}$ га тенг бўлиши аниқланди. Олинган натижалардан фойдаланиб, MnS комплексларининг концентрацияси - $N_{\text{MnS}}\sim 4\cdot 10^{15}\text{ см}^{-3}$ га тенглиги аниқланди.

3. Кремний панжарасида Si_2MnSe комплексларини ҳосил қилиш учун диффузия ҳарорати $T=1160\text{ }^\circ\text{C}$ ва қўшимча термик ишлов бериш ҳарорати $T=820\text{ }^\circ\text{C}$ га тенг бўлиши аниқланди. Селен ва марганец киришма атомларини кетма-кет диффузия қилиш орқали олинган фотоэлементларнинг

параметрларининг қийматларини $U_{\text{сю}} \sim 12\%$ га, $J_{\text{қт}} \sim 22\%$ га ва $P_{\text{тик}} \sim 37,4\%$ га ошиши кўрсатилди.

4. Кремний панжарасида Si_2MnTe комплексларини ҳосил қилиш учун термодинамик диффузия ҳарорати - $T=1160^\circ\text{C}$ га ва қўшимча термик ишлов бериш ҳарорати - $T=650^\circ\text{C}$ га тенг бўлиши аниқланди.

5. Mn атомларининг VI гуруҳ элементлари билан кремнийдаги комплекслари маълум термодинамик шароитларда ҳосил бўлиши аниқланди. Комплекслардаги атомлар кремний кристалл панжарасининг тугунларида жойлашган бўлиб, бу кремний панжарасида янги элементар ячейкаларини шаклланишига олиб келди.

6. Mn ва VI гуруҳ элементларининг атомлари комплекслари учун Гиббс энергия коэффициентининг қиймати $\beta=(2\div 3)\cdot 10^{-3}$ эВ/ $^\circ\text{C}$ га тенглиги аниқланди.

7. Кремний кристалл панжарасидаги Mn атомларининг VI гуруҳ атомлари билан боғланиш энергиясини қийматлари назарий ҳисоблар асосида аниқланди. Улар мос равишда: $E_a^{\text{MnO}}=2,17\div 1,46$ эВ, $E_a^{\text{MnS}}=1,5\div 1,24$ эВ, $E_a^{\text{MnSe}}=1,39\div 1,09$ эВ, $E_a^{\text{MnTe}}=1,24\div 0,87$ эВ га тенг бўлди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 ПО
ПРИСУЖДЕНИЮ СТЕПЕНИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ ПО ФИЗИКО-
МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ ПРИ ФЕРГАНСКОМ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ**

**ТЕРМЕЗСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ТАШКЕНТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

ТУРСУНОВ МАМАСОБИР ОЧИЛДИЕВИЧ

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ МАРГАНЦА С ПРИМЕСЯМИ
VI ГРУППЫ В РЕШЕТКЕ КРЕМНИЯ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

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

Фергана–2022

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером B2022.2.PhD/FM420.

Диссертация выполнена в Термезский государственный университет и Ташкентский государственный технический университет.

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

Научный руководитель:	Илиев Халмурат Миджитович доктор физико-математических наук, профессор.
Официальные оппоненты:	Расулов Рустам Явкахович доктор физико-математических наук, профессор. Хажиев Мардонбек Улутбекович кандидат физико-математических наук, с.н.с
Ведущая организация:	Самаркандский государственный университет

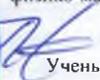
Защита диссертации состоится «10» 09 2022 года в 16⁰⁰ часов на заседании Научного совета PhD.03.27.02.2020.FM.106.01 при Ферганском политехническом институте (Адрес: 150100, Узбекистан, г. Фергана, ул. Ферганская, дом 86. Тел.: (+99873) 241-13-03; факс: (+99873) 241-12-06; e-mail: ferpi_info@edu.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в отделе внедрения информационных технологий Ферганского политехнического института (регистрационный номер 1/3), (Адрес: 150100, г. Фергана, ул. Ферганская, дом 86. Тел.: (+99873) 241-13-03).

Автореферат диссертации разослан «29» 08 2022 года.
(протокол рассылки № 64 от «21» 08 2022 г.)




Н.Х.Юлдашев
Председатель научного совета по присуждению ученой степени, доктор физико-математических наук, профессор.


Б.З.Полвов
Ученый секретарь научного совета по присуждению ученой степени, доктор философии по физико-математическим наукам, доцент.


К.Э. Онаркулов
Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученой степени, физико-математических наук, профессор.

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность работы. В мире активно развивается направление физики полупроводников, в котором пристальное внимание уделяется получению материалов на основе кристаллического кремния с примесными атомами, с новыми свойствами, отличающимися от свойств базового материала. В настоящее время развитые страны планируют развивать производство солнечной энергии и снизить ее стоимость. Технология производства солнечной энергии несколько сложна и требует дорогостоящего сырья и оборудования. В этом аспекте важными задачами являются исследование перспективных функциональных возможностей кремния с новыми ячейками в матрице материала, а также практическое применение таких материалов в микро- и оптоэлектронике, спинтронике и других областях физики конденсированного состояния.

В мире большое значение придается созданию новых солнечных элементов и датчиков на основе технологических и термодинамических условий формирования неравновесных процессов в кремнии, легированном примесными атомами, установлению новых физических явлений и эффектов в кремниевом материале и их функциональные возможности. В связи с этим одной из важных задач является проведение целевых научных исследований, включающих следующие научные исследования: определение необходимых электрофизических параметров исходного полупроводникового материала и состава примесных атомов, выбор методов легирования, связанных с природой исходных материалов, примесные атомы, новые физические явления, эффекты и их функциональные свойства в кремниевом материале, создание новых солнечных элементов и датчиков на основе их возможностей считается актуальной задачей.

В нашей республике реализуются масштабные мероприятия по проведению исследований по созданию новых материалов, которые будут способствовать повышению эффективности и широкому использованию возобновляемых источников энергии. В Стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы, среди прочего, поставлены задачи «Непрерывного снабжения экономики электроэнергией и активного внедрения технологий «Зеленой экономики» во все отрасли, повышения энергоэффективности экономики на 20 процентов определяются. При реализации этих задач одной из важных задач считается разработка солнечных элементов с новыми типами бинарных комплексов.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач предусмотренных в указ Президента Республики Узбекистан № ПФ-60 «О Стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы» от 28 января 2022 года, в постановлениях Президента Республики Узбекистан № ПП-4779 «О дополнительных мерах по сокращению зависимости отраслей экономики от топливно-энергетической продукции путем повышения энергоэффективности экономики и задействования имеющихся ресурсов» от 10 июля 2020 года, № ПП-5063 «О мерах по

развитию возобновляемой и водородной энергетики в республике Узбекистан» от 9 апреля 2021 года, № ПП-3855 « О дополнительных мерах по повышению эффективности коммерциализации результатов научной и научно-технической деятельности» от 14 июля 2018 года, № ПП-3899 «О мерах по повышению эффективности системы интеграции научной и инновационной деятельности» от 6 августа 2018 года, № ПП-5032 «О мерах по повышению качества образования и совершенствованию научных исследований в области физики» от 19 март 2021 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере и изложенных в соответствующих законодательных актах служит для выполнения задач, поставленных в других нормативных актах, связанных с данной деятельностью.

Соответствие исследования приоритетами развития науки и технологий. Диссертация выполнена в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий ППИ-3 – «Энергетика, энерго-ресурсосбережение, транспорт, машино- и приборостроение; развитие современной электроники, микроэлектроники, фотоники, электронного приборостроения, фото энергетики, оптоэлектроники».

Степень изученности проблемы. Вопросы формирования комплексов и изучения специфических особенностей взаимодействия между нанокластерами и материалом окружающей их матрицы, а также их влияния на оптические и электрофизические свойства материала. В мировом масштабе исследуется ряд актуальных проблем - таких как: Людвиг Г.В., Вудбери Х.Х., Карлсон Р.О. (США), Штумпель Х., Сенк Д., Шварц Дж.К. (Германия), Накашима Х., Хасимото К. (Япония), Фистул В.И., Болтакс Б.И., Мильвидский М.Г., Мильвидский А.А. Таскин, Э.Г. Тишковский, А.Н. Лодыгин, В.И. Таланин, Р. Бюб, Р. Бургер (Россия) в экспериментальных исследованиях наблюдалось образование комплексов в решетке кремния в результате воздействия на оптические и электрофизические свойства материала после введения атомов в кремний посредством явления диффузии, и изучение этих явлений совершенствуется.

Академиками АН РУз М.К. Бахадырхановым и А.Т. Мамадалимовым и их учениками исследованы фотоэлектрические, магнитные и оптические свойства кремния, легированного примесными атомами O, S, Se, Te, а также Mn и другими примесями. Вместе с тем, академиком Р.А. Муминовым и его учениками исследованы механизмы мультиэкситонной генерации носителей в кремнии. На сегодня в развитие диффузионной технологии получения кремния с примесными атомами определенный вклад внесла школа академика М.С. Саидова, в частности, профессором И.Г. Атабаевым и Н.А. Матчановым усовершенствована технология низкотемпературной диффузии примесей в сплавы кремний-германий, а также доктором технических наук А.З. Рахматовым предложен новый кассетный способ диффузии примесей, который используется в производстве силовых диодов с оптимизированными параметрами.

Имеющиеся по взаимосвязи диффузионных параметров основных легирующих примесей в кремнии с технологическими условиями, а также слабо систематизированы комплексные влияния комбинаций атомов примесей в нанокластерах на электрофизические и фотоэлектрические свойства кремния.

Связь диссертационного исследования с тематическими планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационное исследование проведено в рамках фундаментальных исследований гранта ОТ-Ф2-55 Ташкентского государственного технического университета на тему «Разработка научных основ получения объемнонаноструктурированного кремния на основе формирования нанокластеров примесных атомов как нового класса наноматериалов с уникальными функциональными возможностями» (2017-2020 гг.), ОТ-Ф2-50 Ташкентского государственного технического университета на тему «Разработка научных основ формирования элементарных ячеек $A^{II}B^{VI}$ и $A^{III}B^V$ в решетке кремния – новый подход в получении перспективных материалов для фотоэнергетики и фотоники» (2017-2020 гг.).

Целью исследования является изучение взаимодействия примесных атомов марганца с элементами VI группы (O, S, Se, Te) в решетке кремния.

В соответствии с поставленной целью решались следующие задачи:

- определить оптимальные диффузионные и технологические условия легирования атомами Mn и элементов VI группы для получения их комплексов в монокристаллического кремния;

- исследовать электрофизические свойства кремния с комплексами типа Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe и Si_2MnTe ;

- исследовать фотоэлектрические и оптические свойства кремния с комплексами Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe и Si_2MnTe ;

- обосновать физические механизмы образования комплексов Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe и Si_2MnTe в кристаллической решетке кремния.

Объектом исследования являются диффузионные структуры, полученные на основе монокристаллического кремния КДБ и КЭФ с кристаллографической ориентацией [111], и с концентрацией бора или фосфора (N_B , $N_P=10^{13}\div 10^{16}$ см⁻³). В качестве примесных атомов для легирования были выбраны элементы - сера, селен, теллур и марганец.

Предметом исследования являются электрические и фотоэлектрические свойства образцов диффузионных структур с различной концентрацией кислорода, бора и фосфора, легированные атомами марганца, а также одной из примесей - сера, селен, теллур в кремний.

Методы исследований. При выполнении поставленных задач были использованы современные методы микронзондового анализа, сканирующий электронный микроскоп, ИК-микроскоп, ИК- спектрометр, спектрофотометр, рентгенофазный анализ.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

- экспериментально определены оптимальные диффузионные и технологические условия легирования атомами Mn и элементами VI группы для получения их комплексов в монокристаллическом кремнии. Определены наиболее эффективные значения температуры для атомов кислорода и марганца – $T=1300\text{ }^{\circ}\text{C}$, серы и марганца – $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$, селена и марганца – $T=820\text{ }^{\circ}\text{C}$, теллура и марганца – $T=650\text{ }^{\circ}\text{C}$;

- показана возможность формирования новых комплексов с участием атомов марганца и элементов VI группы в виде Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe и Si_2MnTe в решетке кремния.

- впервые установлено, что в СЭ, изготовленных на основе монокристаллического кремния, образованного комплексами Si_2MnSe , напряжение холостого хода увеличилось на $U_{\text{xx}} \sim 12\%$, а ток короткого замыкания на $J_{\text{кз}} \sim 22\%$;

- обоснован физический механизм образования комплексов типа Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe и Si_2MnTe . Определен коэффициент энергии Гиббса для образования комплексов с атомами Mn и элементов VI группы и для всех пар его величина равна $\beta=(2\div 3)\cdot 10^{-3}\text{ эВ}/^{\circ}\text{C}$;

- впервые на основе экспериментально определенных концентраций комплексов оценена энергия связи между атомами Mn и элементами VI группы в решетке кремния.

Практические результаты исследования:

- экспериментально определены оптимальные диффузионные и технологические условия легирования атомами Mn и элементами VI группы для получения их комплексов в образцах монокристаллического кремния. Установлено, что атомы кислорода и марганца при $T = 1300^{\circ}\text{C}$, серы и марганца при $T = 1100^{\circ}\text{C}$, селена и марганца при $T = 820^{\circ}\text{C}$, теллура и марганца при $T = 650^{\circ}\text{C}$ при максимальных концентрациях.

Достоверность результатов исследования обосновывается использованием современных средств измерений и методов исследования, совместимостью экспериментальных и расчетных данных с результатами других авторов, а также описанием полученных результатов на основе современных физических моделей физики и техники конденсированного состояния и правильным выбором объекта исследования.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследований, полученных достоверных и воспроизводимых экспериментальных результатов существенно расширяет возможности технологии и физики формирования бинарных комплексов в кремниевом материале, используя новый подход к получению объемных нано- и микроструктурированных полупроводниковых материалов. Впервые на основе экспериментально определенных концентраций комплексов выявлен и обоснован физический механизм энергий связи между Mn и атомами VI группы в решетке кремния.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что оптимальная диффузионная технология формирования комплексов атомов

марганца и VI группы используется при производстве кремниевых солнечных элементов, легированных атомами марганца и VI группы, с недорогой и высокой эффективностью.

Внедрение результатов исследования.

На основе полученных научных результатов изучения взаимодействия атомов марганца с примесями VI группы в решетке кремния внедрены:

Малоэрозионная технология получения фотодиодов высокой чувствительности на основе кремния и разработанная новая двухэтапная низкотемпературная диффузионная технология получения кремниевых материалов, легированных атомами марганца и атомами элементов VI группы, были внедрены и использованы в производстве акционерным обществом «FOTON» (Справка № 04-3/2817 акционерной компании «UZELTEXSANOAT» от 29 декабря 2021 года). Применение научных результатов диссертации дает возможность повышения чувствительность производимых АО «FOTON» диодов и полупроводниковых приборов на основе кремния. Данную работу целесообразно применить для изготовления ФЭП и ФЭМ (фотоэлектрических панелей и модулей) с КПД 17÷19 %;

Разработанная технология получения комплексов типа $\text{Si}_2\text{MnB}^{\text{VI}}$ на основе атомов марганца и элементов VI группы в решетке кремния также была применена в акционерном обществе «FOTON» (Справка №04-3/2817 акционерной компании «UZELTEXSANOAT» от 29 декабря 2021 года). На основе применения полученных научных результатов было достигнуто расширение спектральной области fotocувствительности солнечных элементов. В результате разработанная технология позволила уменьшенным поверхностным сопротивлением эмиттера на 12÷14% и получить солнечные элементы с высоким КПД (19÷20%).

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 8 международных и 6 республиканских конференциях.

Публикации результатов исследования. По материалам диссертации опубликовано 19 научных работ, из них 5 статей опубликованы в журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан, в том числе 3 из них - в республиканских, и 2 - в зарубежных (индексируется в базе данных Scopus) журналах.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы из 92 источников. Объем диссертации составляет 106 страниц, включая 21 таблиц и 28 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность и востребованность темы диссертации, определена связь исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики, раскрыта степень изученности проблемы, поставлены цели и задачи, приведены объекты, предметы и методы исследования, изложена научная новизна и практическая

значимость исследования, приведены краткие сведения о внедрении результатов, апробации и публикации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

В первой главе диссертации под названием «**Современное состояние проблемы и перспективы изучения взаимодействия атомов марганца с атомами элементов VI группы в решетке кремния**» проанализировано современное состояние и последние научные достижения в разработке технологии получения полупроводниковых материалов, содержащих нанокластеры. На основании анализа имеющихся теоретических и экспериментальных данных сформулированы задачи диссертационной работы.

Во второй главе диссертации под названием «**Технология получения кремния с комплексами примесных атомов и методика эксперимента**» исследовались особенности диффузионной технологии получения кремния с комплексами атомов марганца и элементов VI группы в решетке кристаллической кремния.

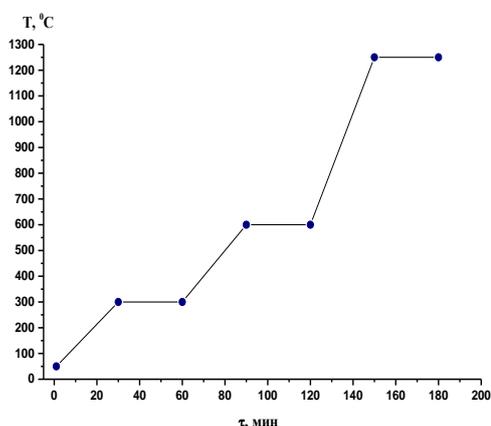


Рис. 1. Технологические режимы - температура и время для проведения низкотемпературного поэтапного диффузионного легирования примесных атомов.

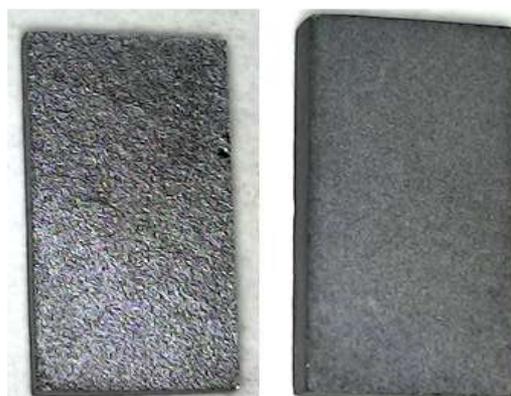


Рис. 2. Поверхность образцов Si, легированного элементами VI группы по разработанной технологии (лицевая и тыльная сторона).

Большой научный и практический интерес представляет взаимодействие примесных атомов между собой или с дефектами кристаллической решетки, особенно определение оптимальных термодинамических условий формирования комплексов примесных атомов в кремния управление их концентрацией и параметрами. Так как в отличие от существующих достаточно сложных способов формирования наноразмерных структур, создание наноконструкций примесных атомов в кристаллической решетке кремния обладает рядом преимуществ и возможностью равномерного образования наноразмерных структур по всему объему кристалла. В связи с этим нами был предложен новый способ легирования кремния, так называемое низкотемпературное и поэтапное легирование.

Для увеличения глубины и поверхностной концентрации примеси при легировании кремния атомами элементов S, Se, Te использована «низкотемпературная» поэтапная технология показано на рис 1.

Установлено, что при использовании этой технологии практически отсутствует эрозия на поверхности кремния (рис. 2).

Оценены возможности использования спектрофотометрического метода для исследования оптических свойств структур, полученных диффузионным методом.

В третьей главе диссертации под названием «**Взаимодействие атомов марганца с атомами VI группы в кремнии**» приведены результаты исследования взаимодействия атомов марганца с атомами VI группы в решетке кремния, с образованием комплексов типа Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe , Si_2MnTe и определены оптимальные технологические условия.

1. В качестве исходного материала были использован монокристаллический кремний p -типа с $\rho=5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ (марки КДБ-5), выращенного методом Чохральского (I группа) и безтигельной зонной плавки (II группа). В этих образцах концентрация кислорода составляла $N_{\text{O}_2}=(5\div 6)\cdot 10^{17}\text{ см}^{-3}$ и $N_{\text{O}_2}\sim 10^{16}\text{ см}^{-3}$ соответственно. Диффузия марганца проводилась из газовой фазы в откачанных кварцевых ампулах при температуре диффузии в интервале $T=1100\div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ с шагом $\Delta T=25 \text{ }^\circ\text{C}$, в течение $t=1 \text{ час}$.

Показано, что с увеличением температуры диффузии в интервале $T=1225\div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ происходит инверсия знака проводимости, т.е. образцы приобретают исходный (p -тип) проводимости, а их удельное сопротивление уменьшается. При $T=1300 \text{ }^\circ\text{C}$ образцы приобретают те же параметры, что и исходные образцы - т.е. становится p -тип проводимости с $\rho=5\div 7 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ (таб. 1).

Эти данные показывают, что с повышением температуры диффузии в интервале $T=1175\div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$ происходит уменьшение концентрации электроактивных атомов марганца и при $T=1300 \text{ }^\circ\text{C}$ их количество становится значительно меньше, чем концентрация исходной примеси бора.

Можно предположить, что такое поведение атомов марганца может быть связано образованием электронейтральных комплексов с ионно-ковалентной связью между атомами кислорода и марганца.

Таблица 1.

Электрофизические параметры образцов кремния, легированных марганцем при температуре $T_{\text{diff}}=1300 \text{ }^\circ\text{C}$, время - 1 час.

Образцы	ТП	Удельное сопротивление, ρ , Ом·см	Подвижность носителей тока, μ , см ² /В·с	Концентрация носителей тока n, p , см ⁻³
Si	p	5	275	$4,5\cdot 10^{15}$
Si<B, Mn>	n	$(1,2\div 1,5)\cdot 10^3$	1100	$(3,7\div 4,7)\cdot 10^{12}$
Si<B,O>	p	5,9	221	$4,8\cdot 10^{15}$
Si<B, O, Mn>	p	$5\div 7$	$350\div 370$	$(2,5\div 3,4)\cdot 10^{15}$

Определены термодинамические условия диффузии для формирования комплексов типа Si_2MnO , при этом температура наиболее эффективного комплексообразования было равно $T=1300 \text{ }^\circ\text{C}$. Используя полученные

экспериментальные результаты рассчитана концентрация комплексов типа MnO , которые был равно $N_{MnO} \sim 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

В образцах II группы, т.е. из кремния, полученного методом безтигельной зонной плавки, в интервале температур диффузии $T=1200 \div 1300 \text{ }^\circ\text{C}$, образцы получают n -типа, но значения удельного сопротивления с повышением температуры диффузии несколько увеличивается.

2. Диффузия примесных атомов марганца и серы проводилась при $T_{diff} = 1100 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение $t = 40$ минут. Были получены образцы $Si\langle B, Mn \rangle$, $Si\langle B, S \rangle$, $Si\langle B, S, Mn \rangle$ которые показано на таб. 2. Диффузии марганца и серы при температуре $T=1100^\circ\text{C}$ получается материал p -типа с удельным сопротивлением $\rho = (4 \div 7) \text{ Ом}\cdot\text{см}$, то есть образцы приобретают практически свои исходные электрофизические параметры. Следовательно, введенные примеси серы и марганца в кремнии теряют электрическую активность.

Таблица 2.

Электрофизические параметры образцов кремния, легированных марганцем и серой при температуре $T_{diff} = 1100 \text{ }^\circ\text{C}$, время $t=0.5$ часа

Образцы	ТП	Удельное сопротивление ρ , Ом·см	Подвижность носителей тока μ , $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	Концентрация носителей тока n, p , см^{-3}
$Si\langle B \rangle$	p	5	275	$4,5 \cdot 10^{15}$
$Si\langle B, Mn \rangle$	n	$4 \cdot 10^4$	1120	$1,4 \cdot 10^{11}$
$Si\langle B, S \rangle$	n	5,75	810	$1,3 \cdot 10^{15}$
$Si\langle B, S, Mn \rangle$	p	$4 \div 7$	$227 \div 359$	$(3,9 \div 4,4) \cdot 10^{15}$

Поэтому мы предполагаем, что между атомами серы и марганца происходит «химическое» взаимодействие (в процессе диффузии марганца), при этом существует оптимальная температура (около $T=1100^\circ\text{C}$) для образования электронейтральных молекул типа $S^{++}Mn^-$. Более высоких температурах термоотжига связь между атомами S и Mn разрушаются, и они будут действовать как обычные донорные примесные атомы.

Определено, что для формирования комплексов типа Si_2MnS оптимальная температура для комплексообразования должны быть равно $T=1100^\circ\text{C}$. Используя полученные экспериментальные результаты рассчитана концентрация комплексов типа MnS , и она была равна $N_{MnS} \sim 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

3. Исследования влияние примесных атомов селена на свойства кремния легированного атомами марганца в качестве исходного материала был выбран монокристаллический кремний p -типа с $\rho=0.5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ($N_B=4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$). Диффузия марганца проводилась при $T=1160 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение $t=30$ минут в кварцевых ампулах методом «низкотемпературной» диффузии. Затем проводилась диффузия Se при $T=1200^\circ\text{C}$ в течение $t=30$ минут. Учитывая сравнительно большую энергию связи в молекуле $MnSe$, а также высокий коэффициент диффузии марганца температура дополнительно термоотжига была выбрана $T=820^\circ\text{C}$. После проведения дополнительного термоотжига измерялись напряжение холостого хода (U_{xx}) и плотность тока короткого

замыкания ($J_{кз}$) солнечного элемента (СЭ) разработочной на основе полученных образцов. В фотоэлементах на основе Si <B, Mn, Se> значение $J_{кз}$ больше на 22%, а значение U_{xx} растет с 427 мВ для СЭ Si <B, Se> до 480 для СЭ Si <B, Mn, Se> (увеличение на 12%) (таб. 3). Увеличение значения параметров СЭ Si<B, Se> после термоотжига мы связываем с геттерирующими свойствами селена, который образует электрически неактивные молекулы с рекомбинационными примесями и центрами. В процессе диффузии селена такие свойства практически не проявляются, так как после диффузии образцы подвергались быстрому охлаждению. Длительный термоотжиг активирует молекулообразование и приводит к геттерированию неконтролируемых примесей и точечных дефектов.

Таблица 3.

Электрофизические параметры солнечных элементов после дополнительной термообработки при $T=820^{\circ}\text{C}$

	$J_{кз}, \text{mA/cm}^2$	U_{xx}, mV	$P_{лик}, \text{mW/cm}^2$
Si<B, Se>	18	427	7,686
Si<B, Mn, Se>	22	480	10,560
Изменение параметров образцов СЭ Si<B, Mn, Se> относительно СЭ Si<B, Se>	+22%	+12 %	+37.4%

Определены условия для формирования комплексов типа Si_2MnSe - температура диффузии примесных атомов селена и марганца $T=1160^{\circ}\text{C}$ и температура отжига (комплексобразования) $T=820^{\circ}\text{C}$. Показано, что после диффузии и дополнительного термоотжига электрофизические параметры СЭ увеличивается U_{xx} на 12%, $J_{кз}$ на 22 %, $P_{лик}$ на 37.4 %.

4. Для исследования влияние атомов теллура на свойства кремния, легированного марганцем в качестве исходного материала, был использован монокристаллический кремний p -типа с $\rho=0,5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ как переднее слухае. Диффузия Те проводилась при температуре $T=1250^{\circ}\text{C}$, марганец диффундировали при $T=1100^{\circ}\text{C}$. Установлено, что солнечные элементы, легирование только примесными атомами марганца при дальнейшей дополнительной термообработкой ухудшается их основные параметры (рис. 3). Однако изменение параметров зависит от величины температуры дополнительного термоотжига, что свидетельствует об изменении состояния атомов марганца в процессе термообработки.

Установлено, что наиболее существенно изменяются параметры образцов Si<B,Te> и Si<B, Te, Mn> при ДТО в интервале температур $T_{анн} = 450\div 900^{\circ}\text{C}$. Параметры СЭ на основе образцов Si<B, Te, Mn> заметно меняются при ДТО в интервале температур $T_{анн} = 450\div 900^{\circ}\text{C}$ (рис. 3). При температуре $T=650^{\circ}\text{C}$ наблюдается максимальная величина параметров СЭ на основе Si<B, Te, Mn>.

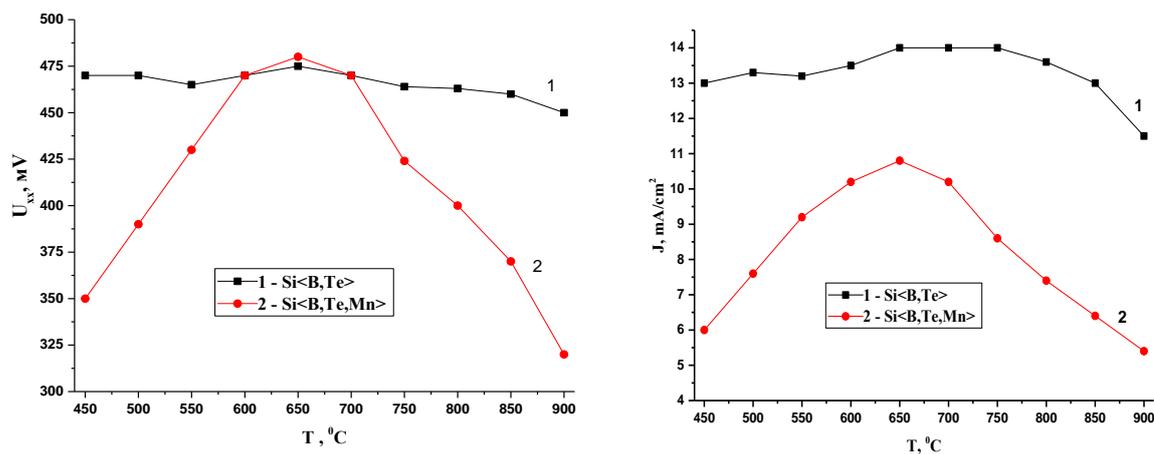


Рис. 3. Зависимости напряжения холостого хода и плотности тока короткого замыкания фотоэлементов от температуры дополнительного отжига.

Мы предполагаем, что при температуре $T=650^{\circ}\text{C}$ происходит интенсивное образование комплексов теллур-марганец, что ослабляет вредное влияние примесных атомов марганца на параметры СЭ.

Определено, что для формирования комплексов типа Si_2MnTe оптимальная температура диффузии должна быть $T=1160^{\circ}\text{C}$. Температура отжига (комплексобразования) была равно $T=650^{\circ}\text{C}$.

В четвертой главе диссертации под названием «**Оптические свойства комплексов атомов марганца с атомами VI группы в кремнии**» приведены результаты исследования оптических свойств кремния с комплексами разных типов соединения. Выявлены физические механизмы образования комплексов атомов марганца с атомами VI группы. Рассчитано энергии Гиббса и энергии связи этих комплексов.

1. В фотоэлементах, на основе кремния легированных атомами селеном и марганцем, в спектральной области $h\nu=1.1\div 2.8$ эВ ($\lambda=1,1\div 0,44$ мкм) наблюдается существенный рост значения J_{K3} относительно контрольного, а его значение практически остается постоянным в области энергий квантов $h\nu=1.3\div 2.5$ эВ.

Эта закономерность может быть объяснена ослаблением поверхностной рекомбинации. Значительное ослабление поверхностной рекомбинации возможно за счет возникновения градиента концентрации положительных многозарядных центров марганца, возникающих при диффузионном легировании, что приводит к формированию электрического поля, отталкивающего дырки от лицевой поверхности (n^+ -слоя) СЭ.

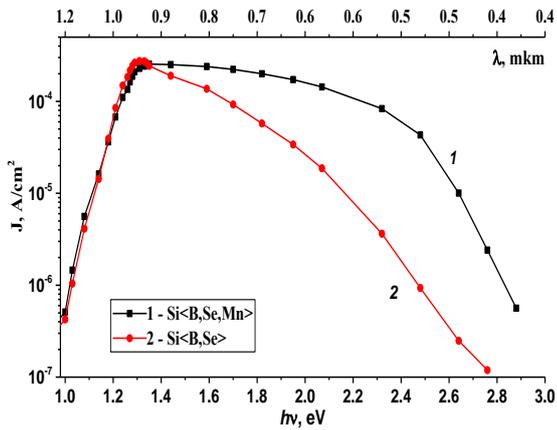


Рис. 4. Спектральные зависимости плотности тока короткого замыкания фотоэлемента, легированного Si <Mn, Se> и Si<Se>.

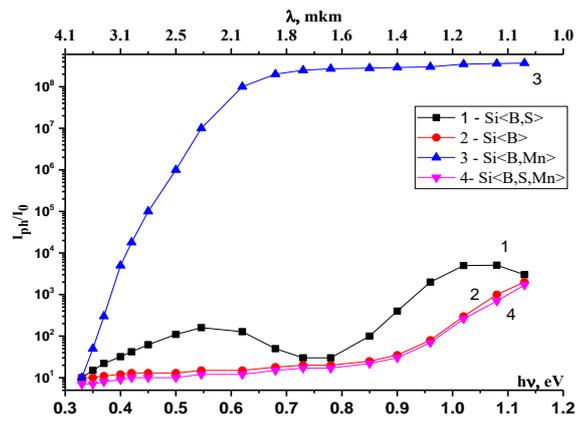


Рис. 5. Спектральная зависимость фотопроводимости образцов Si <B, S>, Si, Si <B, Mn>, Si <B, Mn, S> при температуре 80 К.

Эти результаты показывают, что СЭ на основе кремния легированного атомами марганца и селена увеличивает эффективность фотоэлементов в видимой области спектра (рис. 4). Установлено, что легирование марганцем и селеном позволяет улучшить спектральную чувствительность тока короткого замыкания СЭ.

2. Для полученных образцов (параметры образцов указаны в таблице 2) измеряли спектральную зависимость фотопроводимости при азотной (80К) температуре (рис. 5). Как видно из рисунка (кривые 1 и 3), в образцах Si<S> и Si<Mn> четко проявляется фотоответ, связанный с донорными энергетическими уровнями этих примесей в кремнии. Однако, как видно из рис. 5, кривая 4, в образцах Si <B, S, Mn> не были обнаружены примесные уровни, относящиеся к атомам серы и марганца в кремнии. Этот факт показывает на возможность формирования электронейтральных молекул типа $S^{++}Mn^{-}$ в решетке кремния.

Таким образом экспериментально установлено образование электронейтральных молекул с ионно-ковалентной связью между атомами Mn и атомами элементов VI группы, которые приводят к формированию новых бинарных элементарных ячеек в решетке кремния.

3. После диффузии атомов марганца в образцы кремния (параметры образцов указаны в таблице 1) измеряли концентрацию междуузельного оптического активного кислорода методом Фура-спектрометром марки ФСМ-1202 (рис. 6).

Концентрация оптически активного кислорода была рассчитана с использованием типовой методики:

1) Для образцов, легированных марганцем - Si<Mn>

$$N_o^{OIT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$$

2) Для контрольных образцов - Si <контрольный>

$$N_o^{OIT} = 3.3 \cdot 10^{17} \cdot \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I}{I_0} = 3.15 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$$

3) Относительное изменение концентрации $N_o^{OPT} \text{ Si} \langle \text{Mn} \rangle$ и контрольных в образцах составляло

$$(N_o^{OPT(\text{контрольный})} - N_o^{OPT(\text{Mn})}) / N_o^{OPT(\text{контрольный})} = (3,15 \cdot 10^{17} - 3 \cdot 10^{17}) / 3,15 \cdot 10^{17} = 0,05$$

Таким образом, легирование кремния примесными атомами марганца приводит к уменьшению концентрации оптически активного кислорода на 5%. Это 5% уменьшение соответствует уменьшению концентрации кислорода на $N_o^{OPT} = 1,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Величина изменения концентрации кислорода сравнима с растворимостью Mn при температуре диффузии которые равно $N \sim (1,5 \div 2) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

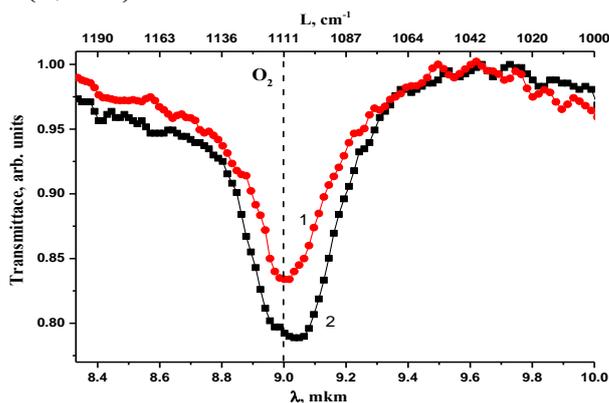


Рис. 6. Зависимость пропускания света образцов кремния легированных марганцем, от длины волны падающего излучения. 1 - Si<Mn>, 2 - контрольный образец.

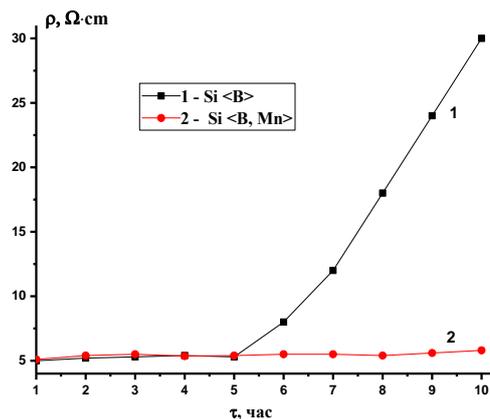


Рис. 7. Влияние термоотжига в интервале температур $T=450 \div 500^\circ\text{C}$. 1 - контрольные образцы, 2 - образцы, легированные Mn.

Эти результаты также могут быть объяснены химическим взаимодействием атомов марганца с оптически активными центрами кислорода, однако из-за низкой растворимости марганца в кремнии при температуре диффузии величина эффекта весьма мала.

4. Максимальная скорость генерации термодоноров в кремнии получается при отжиге в диапазоне температур $T=450 \div 500^\circ\text{C}$. Поэтому нами исследовалось влияние термоотжига при этой температуре (в течении $t=1 \div 10$ часов) на параметры исходных образцов p -типа с $\rho=5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, и образцов, легированных Mn при $T=1300^\circ\text{C}$, которые после легирования атомами Mn приобрели электрические параметры, показанные в таблице 1. Исходные образцы, после дополнительного термоотжига использовались как контрольные для сравнения электрофизических параметров. В контрольных образцах, отожжённых в течение более $t > 5$ часов, наблюдается повышение удельного сопротивления, что свидетельствует о генерации термодоноров.

В то же время электрические параметры образцов, легированных марганцем, остаются практически без изменений (рис. 7).

5. Концентрация комплексов Si(O-Mn) определялась как разность растворимости атомов Mn в интервале температуры $T=1175 \div 1300^\circ\text{C}$ и концентрации электроактивных атомов Mn в образцах, полученных после диффузии $N = N_{\text{Mn}}^0 - N_{\text{Mn}}^1$, где: N_{Mn}^0 – растворимость марганца при данной температуре диффузии, N_{Mn}^1 – концентрация электроактивных атомов

марганца при этой же температуре. Для компенсированных образцов $N_{Mn}^1 = p_0 - p_1$, для перекомпенсированных образцов $N_{Mn}^1 = p_0 + n + f_1(E_1) + f_2(E_2)$, где: p_0 – концентрация дырок в исходном материале, p_1 – концентрация дырок в компенсированных образцах. $f_1(E_1)$ – вероятность заполнения первого энергетического уровня марганца, $f_2(E_2)$ – вероятность заполнения второго энергетического уровня марганца. Значение p_0 , p_1 , n , а также $f_1(E_1)$, $f_2(E_2)$ определены решением уравнения нейтральности с использованием данных, определенных методом эффекта Холла и значений энергетических уровней марганца в кремнии ($E_1 = E_C - 0,27$ эВ) и ($E_2 = E_C - 0,5$ эВ). Как видно из рисунка 8, концентрация комплексов с ростом температуры диффузии растет и при $T = 1300^\circ\text{C}$ достигает $N \sim (3 \div 4) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Эта концентрация сравнима с растворимостью Mn при этой температуре.

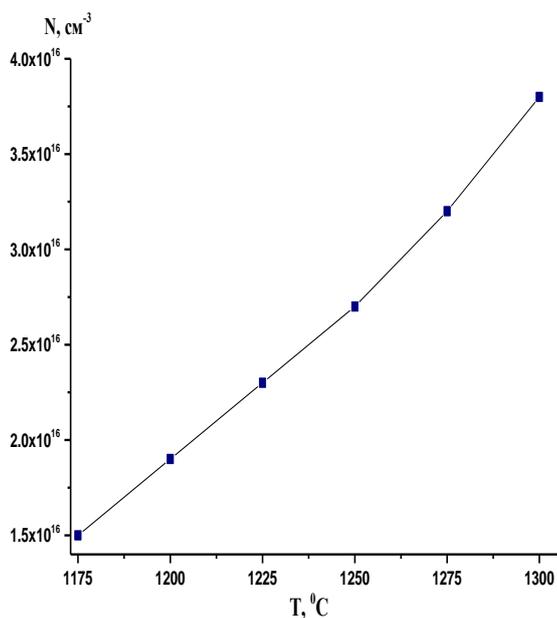


Рис. 8. Температурная зависимость концентрации комплексов Si(O-Mn).

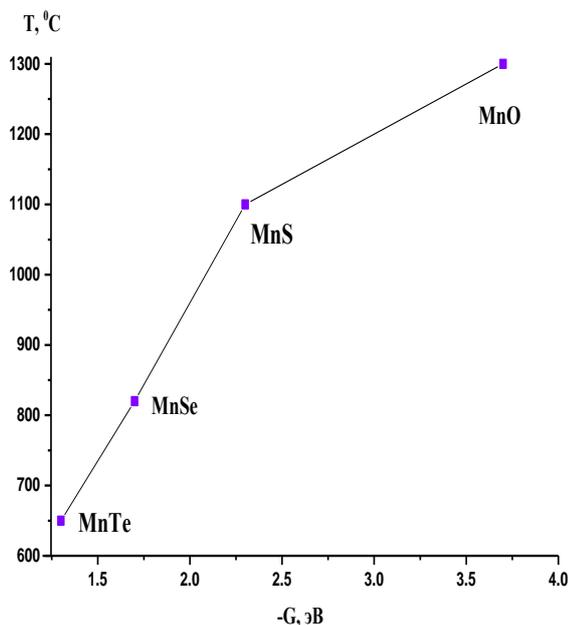


Рис. 9. Зависимость температуры комплексообразования от энергии Гиббса.

6. Анализируя данные, можно указать на наличие чёткой корреляции между температурой наиболее эффективного образования комплексов ($T_{эфф}$, °C) с термодинамической энергией Гиббса (G_{298}^0) соответствующих химических соединений (рис. 9.)

$$\frac{G_{298}^0 < \text{MnO} >}{T_{эффMnO}} = \frac{G_{298}^0 < \text{MnS} >}{T_{эффMnS}} = \frac{G_{298}^0 < \text{MnSe} >}{T_{эффMnSe}} = \frac{G_{298}^0 < \text{MnTe} >}{T_{эффMnTe}} = \beta$$

Отношения энергии Гиббса к температуре наиболее эффективного образования комплексов остаются практически постоянными ($\beta = -(2 \div 3) \cdot 10^{-3}$ эВ/°C) для всех видов комплексов и характеризует коэффициент комплексообразования.

Наличие чёткой корреляции между температурой наиболее эффективного комплексообразования с энергией Гиббса соответствующих соединений явно свидетельствует в пользу химической природы комплексов O, S, Se, Te с атомами марганца. Иными словами, в процессе взаимодействия элементов VI

группы с примесью марганца в кремнии имеет место образование электронейтральных химически связанных комплексов между центром замещения элементов VI группы с центрами замещения марганца.

Показано, что после легирования атомами марганца образцов, предварительно легированных элементами O, S, Se, Te, изменяются электрические параметры образцов такие как - удельное сопротивление, подвижность и концентрация носителей заряда. Изменение концентрации носителей заряда после легирования марганцем объяснено взаимодействием марганца с элементами VI группы в решетке кремния.

7. Физическая модель структуры комплексов атомов марганца и атомами элементов VI группы в решетке кремния показано на рис. 10.

При оптимальных термодинамических условиях происходит формирование электронейтральных комплексов за счет взаимодействия между атомами марганца и элементов VI групп. В результате формирования электронейтральных комплексов создаются новые тетраэдрические ячейки типа комплексов $Si_2 Mn^- O^{++}$, $Si_2 Mn^- S^{++}$, $Si_2 Mn^- Se^{++}$ и $Si_2 Mn^- Te^{++}$ (рис. 10) расположенных в узельлах в решетке кремния, которые не нарушают тетраэдрическую связь решетки кремния и одновременно обеспечивают более выгодное термодинамическое состояние системы.

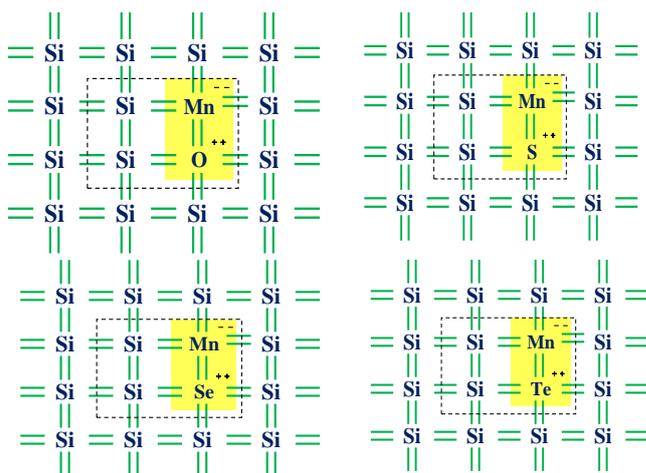


Рис. 10. Структура комплексов $Si_2 Mn^- O^{++}$, $Si_2 Mn^- S^{++}$, $Si_2 Mn^- Se^{++}$ и $Si_2 Mn^- Te^{++}$ в решетке кремния.

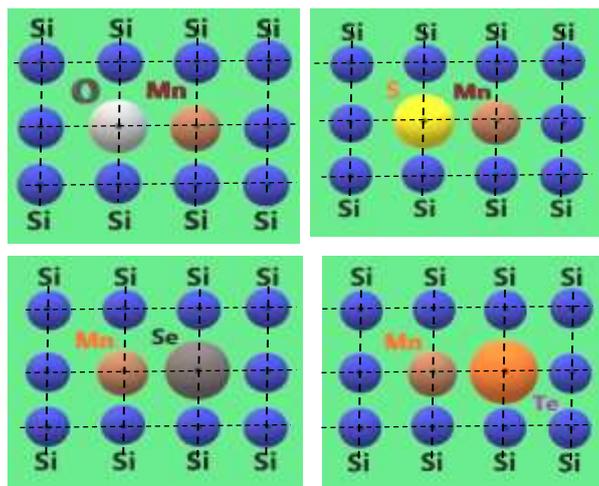


Рис. 11. Структура узельных комплексов между атомами Mn и элементами VI группы в решетке кремния.

Расположение атомов в кристаллической решетке индивидуального соединения и в комплексе, находящемся в решетке кремния показаны в рис. 11. Из анализа расчетных данных видно, что расстояние между атомами в молекулярном комплексе уменьшается. Это можно объяснить влиянием окружающих атомов кристаллической решетки кремния.

8. Для подтверждения модели были вычислены энергии связи марганца и элементов VI группы учитывая ионный тип связи. Исходя из экспериментальных данных о концентрации комплексов (табл. 4) были рассчитаны энергии связи (табл. 5) атомов марганца в комплексах с атомами элементами VI группы с использованием кулоновском взаимодействии (1) с применением соотношения Аррениуса (2):

$$E_{MnVI} = \frac{4kq^2}{\epsilon r_{MnVI}} - \frac{4kq^2}{\epsilon r_{\infty}} \quad (1)$$

$$E_a = kT \ln \left(\frac{N \cdot C_{MnVI}}{4C_{Mn} C_{VI}} \right) \quad (2)$$

Таблица 4.

Концентрации примесных атомов Mn, элементов VI группы и их комплексов в кремний.

$T, ^\circ C$	$C_{Mn}, \text{см}^{-3}$	$C_O, \text{см}^{-3}$	$C_{MnO}, \text{см}^{-3}$	$N, \text{см}^{-3}$
1300	$2 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{17}$	$4 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{22}$
$T, ^\circ C$	$C_{Mn}, \text{см}^{-3}$	$C_S, \text{см}^{-3}$	$C_{MnS}, \text{см}^{-3}$	$N, \text{см}^{-3}$
1100	$1,5 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{16}$	$4 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^{22}$
$T, ^\circ C$	$C_{Mn}, \text{см}^{-3}$	$C_{Se}, \text{см}^{-3}$	$C_{MnSe}, \text{см}^{-3}$	$N, \text{см}^{-3}$
1250	$2 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{15}$	$2,5 \cdot 10^{22}$
$T, ^\circ C$	$C_{Mn}, \text{см}^{-3}$	$C_{Te}, \text{см}^{-3}$	$C_{MnTe}, \text{см}^{-3}$	$N, \text{см}^{-3}$
1250	$2 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{15}$	$2,5 \cdot 10^{22}$

где C_{Mn} - растворимость марганца при данной температуре диффузии, C_{VI} - растворимость элементов VI группы при данной температуре диффузии, C_{MnVI} - концентрация комплексов элементов VI группы и марганца.

Следует отметить закономерность уменьшения энергии связи в комплексах с увеличением размеров атомов элементов VI группы.

Закономерности уменьшения энергии связи комплексов (Mn и O, S, Se, Te) рассчитанная по кулоновскому взаимодействию совпадает энергии Гиббса. Также рассчитанные энергии связи, которые используя экспериментальное значение концентрации примеси и комплексов, подтверждает уменьшения энергии связи комплексов.

Из анализа экспериментальных данных и численных расчетов можно сказать, что физическая модель комплексообразования молекул марганца с атомами элементов VI групп в целом правильна.

Таблица 5.

Энергии связи между атомами Mn и элементами VI группы в решетке кремния.

Бинарные комплексы	Энергия связи, рассчитанная по кулоновскому взаимодействию $E, \text{эВ}$	Энергия связи, рассчитанные с использованием уравнения Аррениуса, $E, \text{эВ}$
Si_2MnO	2,17	1,46
Si_2MnS	1,5	1,24
Si_2MnSe	1,39	1,09
Si_2MnTe	1,24	0,87

При легировании атомами марганца и элементов VI группы практически не происходит изменений электрических параметров материала, что позволяет его использовать для увеличения стабильности электрических параметров кремния в электронных приборах на основе.

В заключение хочу выразить благодарность моему научному консультанту академику М.К. Бахадырханову, научному руководителю профессору Х.М. Илиеву и всему коллективу кафедры «Цифровая электроника и микроэлектроника» ТГТУ за помощь и поддержку, оказанные при выполнении моей диссертационной работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе полученных результатов исследования, проведенного по теме диссертации доктора философии (PhD) «Взаимодействия атомов марганца с примесями VI группы в решетке кремния», представлены следующие выводы:

1. Для безэрозионного легирования кремния элементами VI группы разработано низкотемпературная поэтапная диффузионная технология. Показано, что при использовании этой технологии отсутствует эрозия на поверхности кремния.

2. Определены термодинамические условия диффузии для формирования комплексов типа Si_2MnO , при $T=1300$ °С температуре диффузии происходит интенсивное комплексообразование. Используя полученные экспериментальные результаты, рассчитана концентрация комплексов MnO которые равно $N_{\text{MnO}} \sim 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Определены оптимальная значения температуры диффузии для формирования комплексов типа Si_2MnS - $T=1100$ °С Используя полученные результаты определена концентрация комплексов MnS - $N_{\text{MnS}} \sim 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

3. Определены оптимальная значения температура диффузии $T=1160$ °С, а также температура дополнительного термоотжига $T=820$ °С для формирования комплексов типа Si_2MnSe . Показано, что после последовательной диффузии примесных атомов селена и марганца параметры изготовленных фотоэлементов увеличивается: $U_{\text{хх}}$ на ~12%, $J_{\text{кз}}$ на ~22 % и $P_{\text{ник}}$ на ~37.4 %.

4. Определены оптимальные значения термодинамические условия диффузии $T=1160$ °С и температура отжига $T=650$ °С для формирования комплексов Si_2MnTe .

5. Установлено, что в определенных термодинамических условиях в кремнии образуются комплексы атомов Mn с элементами VI группы. Атомы этих комплексов находится в узлах кристаллической решетки кремния, что приводит к образованию новых элементарных ячеек в решетке кремния.

6. Определен коэффициент энергии Гиббса для образования комплексов атомов марганца с элементами VI группы. Для всех пар его величина было равна $\beta=(2\div 3) \cdot 10^{-3} \text{ эВ/}^\circ\text{С}$.

7. По теоритическим расчетам установлена величина энергии связи атомов Mn с атомами VI группы в решетке кремния были равны: $E_a^{MnO}=2.17\div 1,46$ эВ, $E_a^{MnS}=1,5\div 1,24$ эВ, $E_a^{MnSe}=1,39\div 1,09$ эВ, $E_a^{MnTe}=1,24\div 0,87$ эВ соответственно.

**SCIENTIFIC COUNCIL PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 ON AWARD OF
PHYLOSOFY DOCTOR DEGREE AT THE FERGHANA
POLETECHNICAL INSTITUTE OF UZBEKISTAN**

**TERMEZ STATE UNIVERSITY
TASHKENT STATE TECHNICAL UNIVERSITY**

TURSUNOV MAMASOBIR OCHILDIYEVICH

**INTERACTION OF MANGANESE ATOMS WITH GROUP
VI IMPURITIES IN THE SILICON LATTICE**

01.04.07 – Condensed matter physics

**DISSERTATION ABSTRACT
for the Doctor of Philosiphy (PhD) on Physical and Mathematical Sciences**

Ferghana – 2022

The theme of 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 No. B2022.2.PhD/FM420.

The doctoral (PhD) dissertation was carried out at the Termez state university and Tashkent state technical university.

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

Scientific supervisor: **Iliev Khalmurat Midjitovich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

Official opponents: **Rasulov Rustam Yavkochevich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

Khajiyev Mardonbek Ulugbekovich
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior research scientist

Leading organization: **Samarkand State University**

The defense of the dissertation will take place on «10» 09 2022 at 10⁰⁰ at the meeting of Scientific Council number PhD.03.27.02.2020.FM.106.01 at the Ferghana Polytechnic Institute. Address: 150107, Uzbekistan, Ferghana, 86 Ferghana Str., Tel.: (+99873) 241-13-03, (+99873) 241-12-06; e-mail: uzferfizika@mail.ru.

The doctoral (PhD) dissertation can be looked through in the scientific and methodological department of the Information-Resourse Centre of the Ferghana Polytechnic Institute (registered under No. 1/13) Address: 150107, Uzbekistan, Ferghana, 86 Ferghana Str., Tel.: (+99873) 241-13-03.

Abstract of dissertation sent out on «29» 08 2022
(Registry record No 0067 dated «29» 08 2022)



N.H. Yuldashev
Chairman of scientific council award on scientific degree, Doctor of Physical and mathematical sciences, professor.

B.Z. Polvonov
Scientific secretary of scientific council award of scientific degree, doctor of philosophy (Phd) of physical and mathematical sciences, docent.

K.E. Onarkulov
Chairman of scientific seminar under scientific council on award of scientific degree, Doctor of Physical and mathematical sciences, professor.

INTRODUCTION (annotation of PhD dissertation)

The aim of the research work is to study the interaction of manganese impurity atoms with Group VI elements (O, S, Se, Te) in the silicon lattice.

The object of the research work is diffusion structures obtained on the basis of single-crystal silicon KDB and KEF with crystallographic orientation [111], and with a concentration of boron or phosphorus ($N_B, N_P = 10^{13} \div 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Elements - sulfur, selenium, tellurium and manganese - were chosen as impurity atoms for doping.

The subject of research work is the electrical and photoelectric properties of samples of diffusion structures with different concentrations of oxygen, boron and phosphorus, doped with manganese atoms, as well as one of the impurities - oxygen, sulfur, selenium, tellurium.

Scientific novelty of the research work is as follows:

- experimentally determined the optimal diffusion and technological conditions for doping with Mn atoms and group VI elements to obtain their complexes in single-crystal silicon. The most effective temperature values were determined for oxygen and manganese atoms – $T=1300 \text{ }^\circ\text{C}$, for sulfur and manganese – $T=1100 \text{ }^\circ\text{C}$, for selenium and manganese – $T= 820 \text{ }^\circ\text{C}$, for tellurium and manganese – $T= 650^\circ\text{C}$;

- the possibility of forming new complexes involving manganese atoms and group VI elements in the form of Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe and Si_2MnTe in the silicon lattice is shown.

- it was found for the first time that in Solar cell made on the basis of single-crystal silicon formed by Si_2MnSe complexes, the open-circuit voltage increased by $U_{oc} \sim 12\%$, and the short-circuit current by $J_{sc} \sim 22\%$;

- the physical mechanism for the formation of complexes of the Si_2MnO , Si_2MnS , Si_2MnSe , and Si_2MnTe types is substantiated. The Gibbs energy coefficient for Mn atoms and group VI elements is determined and for all pairs its value is equal to $\beta=(2 \div 3) \cdot 10^{-3} \text{ eV}/^\circ\text{C}$;

- for the first time, on the basis of experimentally determined concentrations of complexes, the binding energy between Mn atoms and group VI elements in the silicon lattice was estimated.

Implementation of research results.

Based on the obtained scientific results of scientific research the interaction of manganese atoms with group VI impurities in the silicon lattice, the following were introduced:

The low-erosion technology for producing high-sensitivity photodiodes based on silicon and the developed new two-stage diffusion technology for producing silicon materials doped with manganese atoms and atoms of group VI elements were introduced and used in production by the FOTON joint-stock company (Reference No. 04-3/2817 of the joint-stock company “UZELTEXSANOAT” dated December 29, 2021). The application of the scientific results of the dissertation makes it possible to increase the sensitivity of the diodes and semiconductor devices produced by JSC "FOTON" based on silicon. It is expedient to apply this work for

the manufacture of solar cells and solar cells (photovoltaic panels and modules) with an efficiency of 17÷19%;

The developed technology for obtaining complexes of the $\text{Si}_2\text{MnB}^{\text{VI}}$ type based on manganese atoms and group VI elements in the silicon lattice was also applied in the FOTON joint-stock company (Reference No. 04-3/2817 of the “UZELTEXSANOAT” joint-stock company dated December 29, 2021). Based on the application of the obtained scientific results, an expansion of the spectral region of the photosensitivity of solar cells was achieved. As a result, the developed technology made it possible to reduce the surface resistance of the emitter by 12÷14% and obtain solar cells with high efficiency (19÷20%).

Approbation of the results of the study. The main scientific results of the dissertation work were reported and discussed at 8 international and 6 Republican scientific and practical conferences.

Publication of the research results. On the topic of the dissertation, 19 scientific works were published, including 5 articles in scientific journals recommended for publication of scientific results of doctoral dissertations at the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan, 3 of them in republican and 2 foreign journals (indexed in the Scopus database).

Structure and volume of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, a list of references from 92 sources and applications. The of the dissertation consists of 106 pages, including 21 tables and 28 figures.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

1. Bakhadyrkhanov M.K., Tursunov M.O., Iiev Kh.M, Isamov S.B., Koveshnikov S.V., Madjitov M.Kh. Electrical Properties of Silicon Doped with Manganese via High-Temperature Diffusion // Inorganic Materials – Moscow, 2021. – Vol. 57. – No. 7. – Pp. 655-662. [№1. Web of Science, IF=0.864].

2. Iiev Kh.M., Tursunov M.O., Ismailov K.A., Ismaylov B.K. Formation of complexes consisting of impurity Mn atoms and group VI elements in the crystal lattice of silicon // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics – Ukraine, 2021. – Vol. 24. – No 3. – Pp. 255-260. [№3. Scopus, IF=0,56] [01.00.00, №7].

3. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Ковешников С.В. Худойназаров З.Б. Исследование свойств кремния с бинарными нанокластерами с участием атомов Mn и Se // Физика полупроводников и микроэлектроника – Ташкент, 2020. – Т. 2. – Вып. 2. – С. 53-58. [01.00.00, №16]

4. Iiev Kh.M., Tursunov M.O., Ismaylov K.A. Interaction of manganese with O, S, Se and Te impurities // Science and Education in Karakalpakstan – Nukus, 2021. – Vol. 18. – № 3. – Pp. 9-13. [01.00.00, №11]

5. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Исамов С.Б., Ковешников С.В. Влияние легирования никелем и марганцем на концентрацию кислорода в кремнии // Физика полупроводников и микроэлектроника – Ташкент, 2021. – Т. 3. – Вып. 3. – С. 28-34. [01.00.00, №16]

II бўлим (II часть; part II)

6. Турсунов М.О. Диффузия марганца в решетке кремния при высоких температурах // Research support center: сборник статей международной научной конференции. В.7. Ч.3.–Ташкент. 9-10 Октября, 2020 г. – С. 60-62.

7. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Ихтиёрова Г.А. Исследования влияния легирования марганцем на свойства кремниевых фотоэлементов // Материалы Республиканской конференции «По физической электронике и фотонике» сборник тезисов докладов, 23 октября, 2019 г. – Ташкент. – С. 166.

8. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Ковешников С.В., Ихтиёрова Г.А. Управление фундаментальными параметрами кремния формированием бинарных нанокластеров // Материалы Республиканской конференции (с участием ученых стран СНГ) «Современные проблемы физики полупроводников» СПФП-2019. 20 ноября 2019 г. - Нукус. – С. 122.

9. Турсунов М.О., Тачилин С.А., Зикриллаев Н.Ф., Исамов С.Б., Ибодуллаев Ш.Н. Особенности фотоэлектрических свойств кремния с нанокластерами атомов марганца в области $\lambda=1.5\div 2$ мкм // Материалы Республиканской конференции «По физической электронике и фотонике» сборник тезисов докладов, 23 октября 2019 г. – Ташкент. – С. 125.

10. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Норкулов Н. Состояние атомов марганца в кремнии при наличии примесных атомов VI группы // Международной научной конференции «Наноструктурные полупроводниковые материалы в фотоэнергетике». 9-10 Октября, 2020 г. –Ташкент. – С. 188-190.

11. Илиев Х.М., Турсунов М.О. Исследование фотоэлектрических свойств р-п перехода, сформированного теллуром совместно с марганцем в решетке кремния // V Международный научно-практической конференции «Оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро и наноструктурах» 13-14 ноября, 2020 г. – Фергана. – С. 57-59.

12. Илиев Х.М., Турсунов М.О. Ковешников С.В., Исамов С.Б., Алпомишов Ж.Х. Влияние легирования никелем на оптически активный кислород в кремнии // Республика илмий-услугий анжумани «Замоновий микроэлектрониканинг ривожланишида фан, таълим ва инновация интеграцияси». 24-25 декабр, 2020 й. – Андижон. – С. 86-88.

13. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Тачилин С.А. Влияние легирования марганцем на концентрацию кислорода в кремнии. // VII Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛАПЛАЗ-2021. В.2. Ч.1., 23 – 26 марта 2021 г. – Москва. – С. 215-216.

14. Турсунов М.О. Молекулообразование атомов марганца с атомами элементов VI группы в кремнии. // Республика илмий-услугий анжумани «Яримўтказгичлар физикаси, микро ва наноэлектроника: фан таълим ва ишлаб чиқариш интеграцияси истикболлари» 21-22 май. 2021 й. Тошкент.

15. Илиев Х.М., Турсунов М.О., Ковешников С.В. Новые функциональная материалы для фотоэнергетике на основе кремнии // VI Всероссийская научно-практическая конференция «Энергетика и энергосбережение: теория и практика» 8-10 декабря 2021 г. – Кемерово. – С.221-225.

16. Турсунов М.О. Кремнийга легирланган марганецнинг кислород ва углерод концентрациясига таъсирини тадқиқ этиш. // Международной научной конференции «Тенденции развития физики конденсированных сред» В.2. Ч.2. 25 май. 2021 г. – Фергана. – С.317-319.

17. Илиев Х.М., Турсунов М.О. Новые материалы для фотоэнергетики на основе кремния // Международная конференция «Энерго и ресурсосбережение: новые исследования, технологии и инновационные подходы» 24-25 сентября. 2021 г. – Карши. – С. 207-211.

18. Бахадырханов М.К., Турсунов М.О., Илиев Х.М., Ковешников С.В., Норкулов Н., Маджитов М.Х. Состояние атомов теллура в решетке кремния // “Яримўтказгичлар физикаси, микро- ва наноэлектрониканинг фундаментал ва амалий муаммолари” мавзусидаги I халқаро анжуман. 28-29 октябрь. 2021 й. – Тошкент. – б. 153-154.

19. Бахадырханов М.К., Турсунов М.О., Илиев Х.М., Ковешников С.В., Норкулов Н., Маджитов М.Х. Комплексообразование марганца с элементами O, S, Se, Te в Si // «Наноструктурные полупроводниковые материалы в фотоэнергетике» II международная научная конференция. 19-20 ноября. 2021 г. – Ташкент. – с. 153-157.

Илмий раҳбар  Х.М.Илиев.

Талабгор  М.О.Турсунов.

Авторефератнинг ўзбек, рус ва инглиз тилларидаги нусхалари
Фарғона политехника институти муассислигидаги “**Scientific technical
journal**” журнал таҳририятида таҳрирдан ўтказилди.
(10.03.2022 й.)

Босишга рухсат этилди: 2022 й. Нашриёт босма тобоғи-3.5
Рақамли босма усули. Times гарнитураси.
Шартли босма тобоғи-1,75. Бичими 64x108 1/16. Адади 100.

“Poligraf Super Servis” МЧЖ
150100. Фарғона шаҳар, Авиасозлар кўчаси 2-уй.