

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ**

ШАРОПОВ ЎТКИРЖОН БАХОДИРОВИЧ

**КЕНГ ЗОНАЛИ LiF, SiO₂, ZnO КРИСТАЛЛАРИДА СИРТ
НУҚСОНЛАРИ**

01.04.04. - Физик электроника

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc) ДИССЕРТАЦИЯСИ
АВТОРЕФЕРАТИ**

ТОШКЕНТ-2023

Докторлик (DSc) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата докторской (DSc) диссертации Contents of the
of Doctoral (DSc) Dissertation Abstract

Шаропов Ўткиржон Баходирович Кенг зонали LiF, SiO ₂ , ZnO кристалларида сирт нуқсонлари	3
Шаропов Уткиржон Баходирович Поверхностные дефекты в широкозонных кристаллах LiF, SiO ₂ , ZnO	28
Sharopov Utkirjon Bahodirovich Surface defects in wide band gap crystals LiF, SiO ₂ , ZnO	54
Эълон қилинган ишлар рўйхати Список опубликованных работ List of published works	58

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ**

ШАРОПОВ ЎТКИРЖОН БАХОДИРОВИЧ

**КЕНГ ЗОНАЛИ LiF, SiO₂, ZnO КРИСТАЛЛАРИДА СИРТ
НУҚСОНЛАРИ**

01.04.04. - Физик электроника

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc) ДИССЕРТАЦИЯСИ
АВТОРЕФЕРАТИ**

ТОШКЕНТ-2023

Докторлик (DSc) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2022.4.DSc/FM25 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Ион-плазма ва лазер технологиялари институтида ва Физика-техника институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (<http://iplt.uz/>) ҳамда «Ziyonet» Ахборот-таълим порталида (www.ziyonet.uz) жойлаштирилган.

Илмий маслаҳатчи:	Эгамбердиев Баҳром Эгамбердиевич физика-математика фанлари доктори, профессор
Расмий оппонентлар:	Комолов Алексей Сергеевич физика-математика фанлари доктори, профессор Максимов Сергей Евлантиевич физика-математика фанлари доктори Ниматов Самад Жайсанович физика-математика фанлари доктори
Етакчи ташкилот:	Мирзо Улугбек номидаги Ўзбекистон миллий университети

Диссертация химояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2023 йил «8» февраль оят 1430 даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz, Ион-плазма ва лазер технологиялари институти мажлислар зали).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (1 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-31-69.

Диссертация автореферати 2023 йил «27» январь кунлари тарқатилди.
(2023 йил «27» январь даги 1 рақамли реестр баённомаси).



Х.Б.Ашуров

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

И.Д.Ядгаров

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

Б.Е.Умирзаков

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

КИРИШ (Фан доктори (DSc) диссертация аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Бугунги кунда жаҳонда, юқори технологияли материалларга шундай талаблар қўйилдики, бу ҳажмий хусусиятлардан фарқли ўлароқ, махсус ишчи хусусиятларига эга бўлган сирт бўлиши кераклиги долзарб илмий ва амалий вазифа ҳисобланади. Дунё миқёсида сирт муҳандислиги фан ва технологиялар соҳасида кенг қўлланилаётганлиги туфайли атом зарралари ва ионлаштирувчи нурланиш таъсирида кенг ҳудудли материаллар сиртида нуқсонлар пайдо бўлиши билан боғлиқ бўлган жараёнларни ўрганиш ва амалиётга жорий этишни тақозо этади. Шу жиҳатдан ушбу материалларнинг сирт хусусиятларини электрон ва ионлар билан бомбардимон қилиш асосида ўзгартириш жараёнларининг ўрганишга қаратилган тадқиқотлар жуда муҳим аҳамиятга эгадир.

Бугунги кунда дунёда кенг ҳудудли материалларда нуқсонларнинг пайдо бўлишига қизиқиш наноэпитаксия муаммоларини ҳал қилиш, нурланишнинг кристаллар ва юпқа қатламлар сирти билан ўзаро таъсир механизмлари аниқлашга йўналтирилган илмий-тадқиқот ишлари олиб борилмоқда. Бу борада, кенг ҳудудли кристаллар сиртини паст энергияли электронлар ва ионлар билан нурлантириш натижасида пайдо бўладиган нуқсонлар сирт физикаси учун жуда муҳим аҳамиятга эгадир. Шунингдек, сирт нуқсонлари ва кристалл сиртида кластерларнинг чангланиш жараёнлари ўртасидаги муносабатлар кам ўрганилган бўлиб, экспериментал ва назарий тадқиқотлар ўтказишни талаб қилади. Шу нуқтани назардан, p-n бирикмаларини олиш жараёнида нуқсонлар муҳандислигида фойдаланиладиган сирт нуқсонларининг айрим турлари - нурланишли рағбатлантирилган диффузия, планар-эпитаксиал усул ва имплантация жараёнларида катта қизиқиш уйғотади. Яқин вақтгача микроэлектроникадаги энг заиф нуқталардан бири бу, сиртда ион имплантацияси, диффузияси ва бошқа технологик жараёнлар пайтида сиртдаги нуқсонларни эътиборсиз қолдириш ва у ҳақидаги маълумотларни етишмовчилиги эди. Охирги гапимиздаги муаммоларни ечимини топишга ва керакли хусусиятларга эга сиртни олиш учун нуқсон муҳандислигидан фойдаланишга алоҳида эътибор берилмоқда.

Республикамизда ушбу мавзу бўйича муҳим илмий изланишларни олиб борилмоқда, хусусан, диэлектриклар таркибидаги нуқсонларни бутун ҳажм бўйича ўрганиш бўлиб, бунда материал қайтадан аморфланади ва кристалл тузилиши ўзгаради, бундай материаллар ҳосил қилиш имконини берадиган технологияларни ишлаб чиқиш юзасидан кенг қамровли чора-тадбирлар амалга оширилиб, муайян натижаларга эришилмоқда. Хорижлик етакчи олимлар иштирокида бир қатор халқаро анжуманларда нашр қилинган монографиялар, мақолалар ва республикада ҳар йили ўтказиб келинаётган тадбирлар ушбу йўналишда эришилган ютуқлар ва Ўзбекистон олимлари томонидан олинган натижаларни халқаро ҳамжамият томонидан эътироф этилишидан далolat беради. Хозирги кунда кенг ҳудудли кристалларга асосланган янги микроэлектроник қурилмаларни ишлаб чиқишда фундаментал муаммога дуч келинмоқда: сиртдаги нуқсонлар p-n бирикмаларини олиш жараёнларини

рағбатлантиради ёки рағбатлантирмайди. Шу нуқтаи назардан, p-n бирикмаларини ишлаб чиқиш жараёнида нурланиш билан рағбатлантирилган диффузия, планар-эпитаксиал усул ва имплантация учун нуқсон муҳандислигида ишлатиладиган баъзи бир сирт нуқсонлари катта қизиқиш уйғотади. Шундай қилиб, кенг ҳудудли кристалларда сирт нуқсонларни ўрганиш замонавий материалшунослик соҳасидаги устувор ва долзарб вазифа бўлиб, у янги авлод микроэлектрон қурилмаларнинг элемент базаси учун материалларни излаш ва яратиш билан шуғулланади.

Ушбу диссертация тадқиқотлари маълум даражада Президентимизнинг 2017 йил 7 февралдаги “Ўзбекистон Республикасида бошқарувни янада ривожлантириш стратегияси тўғрисида” ги ПФ-4947-сонли Фармонида ва Президентимизнинг 2017¹ йил 7 февралдаги ПҚ-2772-сонли “2017-2021 йилларда электр саноатини бошқариш, жадал ривожлантириш ва диверсификациялаш, ва кейинчалик такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида” ги Фармонида белгиланган вазифаларни, “Фанлар академияси фаолиятини янада такомиллаштириш, илмий-тадқиқот фаолиятини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштириш чора-тадбирлари тўғрисида” 2017 йил 13 февралдаги ПҚ-2789-сонли 2017 йил 17 февралдаги қарорлари, ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация иши муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Ушбу тадқиқотлар Ўзбекистон Республикаси фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мос ҳолда амалга оширилган: II. «Физика, астрономия, энергетика и машинасозлик.

Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳи².

Нуқсонларнинг шаклланиши ва турли моддаларнинг сирт таҳлили соҳасидаги илмий изланишлар, шунингдек қаттиқ жисм сиртида содир бўладиган физик-кимёвий жараёнларни тадқиқ қилиш жаҳоннинг етакчи марказларда, олий ўқув юртларида олиб борилмоқда, жумладан: Санкт-петербург давлат университети, қаттиқ жисм сирти электроникаси лабораторияларида (Россия), Шанхай университети, Материалшунослик ва муҳандислик мактаби илмий лабораторияларда (Хитой), Россия Фанлар академиясининг Қаттиқ жисмлар физикаси институти ва А.Ф. Иоффе номидаги Физика ва технология институти, Яримўтказгичларда киритиш ва нуқсонларини яратиш лабораториясида (Россия), Копенгаген университети, Физика бўлими (Дания) ва АНРУз ядро тадқиқотлари институти.

Жаҳон миқёсида кенг ҳудудли кристалларда нуқсон пайдо бўлишини

¹ 2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси / Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли Фармонига 1-илова, п. 3.2.

² Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳи: www.sciencedirect.com, www.springerlink.com, www.elsevier.com, www.scopus.com, www.nature.com, www.oxfordjournals.org, www.sciencemag.org, www.northcarolina.edu, www.umb.edu, www.osu.edu, www.stonybrook.edu, www.bw.edu www.msu.ru, ва бошқа манбалар асосида ишлаб чиқилган.

тадқиқ қилиш соҳасида бир қатор долзарб муаммолар ҳал қилинган ва қуйидаги муҳим илмий натижалар олинган: УФ нурланишининг дозиметрияси, лазер ҳосил қилишда, кенг ҳудудли гетероструктуралар ва Шоттки фотодиодлари ясашда қўлланиладиган ZnO кристалларини тайёрлаш бўйича тадқиқотлар дунёнинг кўплаб олимлари томонидан олиб бориляпти, шу жумладан: америкаликлар (Schrier, A.P. Alivisatos), рус (Ж.И. Алферов, С.В. Иванов), хитой (P. Chen, Y. Wang), ўзбекистонда (Е.М. Ибрагимова, С. Қурбонов) ва бошқа мутахассислар.

Ҳозирги кунда дунёда кенг ҳудудли кристаллар сиртидаги нуқсонларни ҳосил қилиш, аниқлаш ва таҳлил қилиш усулларни ва асбобларни ишлаб чиқиш соҳасида кўплаб тадқиқотлар олиб борилмоқда. Шунингдек, кенг ҳудудли кристалларнинг физик-кимёвий сирт хусусиятларини ўрганиш қуйидаги йўналишларда долзарб ҳисобланади: қаттиқ жисм сиртини тозалаш ва адсорбция қилиш жараёнлари; р-н бирикмаларини олиш учун нуқсонлар муҳандислигида ишлатиладиган баъзи турдаги нуқсонларни - нурланишли рағбатлантирилган диффузия, планар-эпитаксиал ва имплантацияли усул асосида ишлаб чиқиш ва яратиш; нуқсон пайдо бўлиши жараёнида физик-кимёвий сирт хусусиятларини аниқлаш.

Қуйидаги нуқсонлар билан боғлиқ бўлган тадқиқотлар бажарилмаган: сирт ҳолати ва электрон тузилмаси, турли хил нурланишларнинг сиртдаги нуқсонларнинг шаклланишига таъсири, заряднинг сирт стохиометрияси билан боғлиқлиги, кислород концентрацияси, сиртдаги нуқсонларнинг намуналарни сиртини оксидланиш ва тозалаш жараёнларидаги физик-кимёвий аҳамияти, нуқсонларнинг нурланишли рағбатлантирилган диффузия ёрдамида р-н ўтишлар яратиш имконияти.

Бутун дунёда истиқболли соҳаларда, хусусан планар технологияларда, микроэлектроникада, оптоэлектроникада, замонавий материалшуносликда, паст ўлчовли тизимларнинг нанотехнологиясида кенг ҳудудли кристалларда нуқсон пайдо бўлишини ўрганиш бўйича илмий тадқиқотлар олиб борилмоқда.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Нуқсонларнинг пайдо бўлиши билан боғлиқ изланишларнинг аксарияти К. Шварц ва Ч.Б. Луцик ва А.Ч. Луциклар томонидан электронлар ва юқори (МэВ) энергияли ионларда олиб борилган. Шунинг учун, кам энергияли (субкэВ) электронлар ва ионлар билан нурлантирилганда, қаттиқ жисмлар сиртида нуқсон пайдо бўлишини экспериментал ўрганиш, нуқтавий нуқсонлар ва агрегатларининг пайдо бўлиш механизмларини тушунтириш, кейин эса уларни бирлашиб марказларга айланиши муҳим масаладир.

Маҳаллий ва чет эл тадқиқотчиларининг таҳлили шуни кўрсатадики, ишларнинг катта қисми қуйма кристаллар асосида нуқсон ҳосил бўлишини ўрганишга бағишланган (Закис Ю.Р.). Бир нечта асарлар ион кристаллари юққа қатламлари нурлантирилганда нуқтавий нуқсонларнинг пайдо бўлиш шароитлари комплекс ўрганилган (Голек, Соболевски). Ҳозирда Т.Т. Басиев, Л.Н. Демянцев юққа қатламли лазерлардан муваффақиятли фойдаланиш учун агрегатли нуқсонларнинг зичлиги ва барқарорлигини 2-3 маротаба оширишни кераклигини кўрсатиб беришди. Самарадорликни бундай сезиларли даражада

орттириш учун кенг хуудли кристалларни сиртга яқин жойларида содир бўладиган энг муҳим кўзғатиш жараёнлари секин электрон ва ионлар ёрдамида амалга оширишни, ҳамда нуқтавий нуқсонлар ва уларнинг агрегатларини ҳосил қилиш билан боғлиқ бўлган янги тадқиқотларни ташкил қилишни талаб қилади.

Юпқа қатламли намуналарда нуқсон пайдо бўлиши жараёнлари кам ўрганилган бўлиб, бунинг асосий сабаби яримўтказгич монокристаллар сиртида диэлектрик материалларнинг ингичка эпитаксиал қатламларини олишдаги муаммолар ва кам концентрацияли нуқтавий нуқсонларни ҳосил қилишдаги қийинчиликлар билан боғлиқ. Юпқа диэлектрик қатламлардаги нуқсонларни аниқлаш учун сиртга сезгир бўлган усулларни ишлаб чиқиш керак бўлади. Паст энергияли электронлар ва ионлар билан нурлантирилганда ион кристалларининг ўсиб бораётган қатламлари сиртида нуқсон пайдо бўлиши жараёнлари хали дастлабки ўрганиш босқичида турибди. Шунинг учун ион кристаллари қатламларида нуқтавий нуқсонлар ва уларнинг агрегатлари пайдо бўлиш шароитларини ҳар томонлама ўрганиш долзарб илмий ва амалий вазифадир.

Шу билан бирга, сиртдаги нуқсонларни шакллантириш механизмларининг кўп жиҳатлари ҳозирги кунгача номаълум бўлиб қолмоқда. Раджабов, Авмаур, томонидан аниқланган "Кулон портлаши" ёки "Нуқсонлардан келиб чиққан чанганиш" ни нима кўзғатади? деб аталган моделлар мустақил равишда ўрганилган, шунга қарамай диэлектрикларнинг потенциал чангланиш сирлари ноаниқ бўлиб қолмоқда. Шу билан бирга, каттик моддаларда нуқсон пайдо бўлиши ўзбекистонлик олимлар Э.М. Ибрагимова ва И. Нуритдиновлар, шунингдек Б.Г. Атабаев бошчилигидаги институтимизда лаборатория ҳам фаол ўрганилмоқда. Булар, шунингдек, электрон ва ион нурланиш пайтида кенг хуудли кристаллар сиртида нуқсонларнинг пайдо бўлиши билан боғлиқ ҳалигача ҳал этилмаган қатор вазифалар, ушбу диссертациянинг асосини ташкил қилган.

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган олий таълим ёки илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация иши Ион-плазма ва лазер технологиялари институти илмий тадқиқот ишчи режасининг кўйидаги фундаментал лойиҳалари доирасида бажарилган: Ёш олимларнинг ФЁ2-ФА-Ф102 рақамли фундаментал илмий лойиҳаси "Электрон спектроскопияси ва иккиламчи ион масс-спектрометрия методлари ёрдамида кўп компонентли кристаллар сиртини ионлар ва электронлар билан бомбардимон қилганда ҳосил бўладиган сирт нуқсонларини ва чангланишни ўрганиш" (2012-2013 йй.) ва ЁФ2-ФА-1-12507 "Рух оксид кристалларини ионлар ва электронлар билан бомбардимон қилганда ҳосил бўладиган сирт нуқсонларини ва чангланишни ўрганиш" (2016-2017 йй.) фундаментал илмий лойиҳаси, шунингдек, Ислом Каримов номидаги Тошкент давлат техника университетида бажарилган ОТ-Атех-2018-474 рақамли "Кремний пластинкаларини паст температурали ионли тозалаш ва уни электрон-спектрометрик усулда бошқариш технологияси" (2018-2020) амалий илмий тадқиқотлар лойиҳаси.

Тадқиқотнинг мақсади электрон ва ион нурланиши пайтида кенг ҳудудли кристаллар сиртида пайдо бўладиган нуқсонларнинг шаклланиш қонуниятларини аниқлаш, шунингдек уларнинг сирт ҳолатлари ва сиртда юз берадиган бошқа физикавий жараёнлар билан боғлиқликни аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

юқори вакуумли тўлиқ ток (ТТ) спектроскопия ускунасини модернизация қилиш;

электрон ва ионлар билан нурланиш пайтида ТТ спектроскопияси усули билан сиртда нуқсонлари шаклланишини ўрганиш методини ишлаб чиқиш;

LiF/Si(111) сиртини электронлар билан нурлантирилганда нуқсонларнинг пайдо бўлишини текшириш;

LiF/Si(111) сиртини ионлар билан нурлантирилганда нуқсонларнинг шаклланишини ва уларнинг чангланишга таъсирини ўрганиш;

электрон ва ионлар билан нурлантириш пайтида SiO_x кристаллари сиртида нуқсонлар ва уларнинг кластерларининг пайдо бўлишини ўрганиш;

SiO_x кристаллари сиртидаги нуқсонларнинг тозаланиш ва оксидланиш жараёнларига таъсирини ўрганиш;

электрон нурлантириш остида ZnO сиртида нуқсонларининг пайдо бўлиш чегараларини аниқлаш тадқиқотларини ўтказиш;

ZnO сиртида ҳосил бўлган зарядлар ва нуқсонларнинг сирт ҳолатларига таъсирини аниқлаш ва ўрганиш;

Тадқиқотнинг объектлари сифатида кенг ҳудудли литий фтор, кремний ва рух оксиди кристаллари олинган.

Тадқиқотнинг предмети бўлиб ўрганилаётган намуналарнинг нуқсонли ва ўзгартирилган сиртини, шунингдек, нейтрал, мусбат ва манфий зарядланган зарраларнинг иккиламчи ион эмиссиясини олиш имконини берувчи электрон ва ион бомбардимони билан сирт ҳолатларини рағбатлантириш жараёнини ифодаладиган физикавий механизмлар, аналитик боғланишлар ва математик моделлар, қурилманинг параметрлари, иш режимлари ва кўрсаткичлари ҳамда уларнинг ўзгариш қонуниятлари ҳисобланади.

Тадқиқотнинг усуллари. Тадқиқот жараёнида нуқсонлари тўғрисида миқдорий маълумот олиш учун ТТ спектроскопияси усули, чангланиш жараёнларида нуқсонларнинг ролини ва сирт ҳолатини аниқлаш учун иккиламчи ион массали спектрометрия (ИИМС) усули билан қиёсий тадқиқотлар олиб борилди, шунингдек SRIM дастурий таъминоти ёрдамида жараёнларини моделлаштириш амалга оширилди. DFT, математик статистика таҳлил усуллари, хатолик даражасини аниқлаш, экспериментларни режалаштириш ҳамда мавжуд меъёрий ҳужжатларда белгиланган усуллардан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

тўлиқ ток спектроскопиянинг юқори вакуумли аппарати модернизация қилинди ва ZnO, SiO_x/Si(111), унда LiF кристалларини электронлар ва ионлар билан нурланиш, чангланиш, нуқсон шаклланишини, чиқиш ишини ўзгартиришини, сиртнинг ҳудудли тузилиши комплекс ўрганиш методикаси

яратилган;

биринчи марта чангланган иккиламчи кластердаги нуқсонларни масса спектрлари ёрдамида аниқлаш усули ишлаб чиқилди. Ишқорий галогенид кристаллари сиртида ҳосил бўлган нуқсонлар чангланиш жараёнини рағбатлантиради ва шу билан бирга улар иккиламчи ионлар билан бирга сиртдан чангланади. Ишқорий галогенид кристалларини нурлантириш жараёнида сирт чангланиши «Defect Mediated Sputtering» механизми туфайли содир бўлиши кўрсатилди;

илк бор LiF/Si кристаллини электрон ва ионлар билан нурлантириш натижасида сиртда микроскопик галоген агрегатлари пайдо бўлиши кўрсатилган;

тўлиқ ток спектроскопияси ва SRIM усуллари ёрдамида, бирламчи ионнинг массаси ортиши билан LiF ва Si кристаллининг сиртида хажмига қараганда кўпроқ бўшлиқлар ва оралиқ нуқсонлар пайдо бўлиши аниқланган. Тадқиқот натижалари сирт нуқсонларини шаклланиш механизмларини яхшироқ тушунишга имкон берди;

тозаланган ва оксидланган кремний кристалларининг тўлиқ ток ва масс спектрлари асосида, адсорбция, десорбция ва оксидланиш каби сиртда содир бўладиган бошқа жараёнлар билан алоқаси борлиги аниқланди;

илк мартаба кремний сиртини манфий ва мусбат ионлар билан нурлантиришда сирт ҳолатини солиштирилиб тадқиқ қилинди. Мусбат ионлар билан нурлантирилганда сиртни оксидлардан тозаланиши, манфий ионлар билан нурлантирилганда намуна юзасининг кучли оксидланиши кузатилди;

тўлиқ ток спектроскопия усули билан (0,5-1,0 эВ энергия оралиғида) кремний сиртида нуқсонлар, кислородга дефицит марказлари мавжудлиги аниқланди;

илк бор рух оксиди кристаллари сиртига паст энергияли ($E=0\div 600$ эВ) электронларнинг таъсири ўрганилди: сиртдаги зарядларнинг кузатилган кинетик хусусиятлари электронлар учун тузоқ бўлган нуқсонлар билан боғлиқлиги аниқланди;

рух оксиди кристали юзасини электрон билан бомбардимон қилишда заряд ҳосил бўлиши икки қаватли зарядлаш модели асосида содир бўлиши кўрсатилган;

кенг ҳудудли кристаллар юзасида нуқсонлар шаклланиши ва парчаланишининг математик моделлар ишлаб чиқилди.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

Иккиламчи кластердаги нуқсонларни масса спектрлари ёрдамида аниқлаш амалиёти, шубҳасиз, физик электроника соҳасида муҳим аҳамиятга эга бўлиб, чангланиш пайтида нуқсонларни аниқлашга имкон беради.

Тоza кремний сиртини олиш имконини берадиган аввал ион билан нурлантириб, кейин 650°C ҳароратда қиздириш усули таклиф этилди;

Кислород дефицит марказлари орқали кремний сиртини оксидланиш кинетикаси намуна тайёрлашдан олдин МДП тузилмаларининг қалинлигини самарали равишда бошқариш имконини беради, бу шубҳасиз микроэлектроника соҳасида муҳим рол ўйнайди;

Маълум нуқсонлар ҳосил бўлишига олиб келадиган, таглик сиртини зарядловчи электронлардан фойдаланган ҳолда эпитаксиал қатламлар ишлаб чиқаришнинг такрорланадиган технологияси ишлаб чиқилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги нуқсонларни хусусиятларини тадқиқ қилишда замонавий юқори аниқликдаги замонавий асбоблар ва спектрометрик ТТ ва ИИМС усуллардан усулларнинг қўлланилганлиги; бунинг учун муаллифлик гувоҳномалари олинганлиги ва турли усуллар билан олинган тажриба натижаларининг ўзаро боғлиқлиги, шунингдек, DFT, математикавий математик регрессия, молекуляр динамиканинг (МД) назарий натижалари; ўлчов хатоликларини таҳлил қилиш; олинган натижаларнинг умумий жисмоний тушунчалар ва мавжуд адабиёт маълумотлари билан мувофиқлиги билан асосланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Ушбу диссертация натижаларининг илмий аҳамияти бир нечта усуллардан биргаликда фойдаланиш, электронлар ва ионларнинг қаттиқ жисм сирти билан ўзаро таъсири тўғрисида тушунчани кенгайтириш, сиртда нуқсонлар ҳосил қилишнинг умумий схемасини ўз ичига олади.

Кенг ҳудудли кристаллардаги нуқсонлар ва уларнинг агрегатлари тўғрисида олинган маълумотлар материалларнинг радиацион қаршилигини аниқлаш, эпитаксиал қатламлар конденсациясини рағбатлантириш ва ўрганилаётган материал сиртининг электрон тузилишини электрон ва ион нурлари ёрдамида таҳлил қилиш учун муҳимдир. Кенг ҳудудли кристаллар учун олинган қонуниятлардан бошқа турдаги моддаларда кузатиладиган ҳодисаларни изоҳлаш учун фойдаланиш мумкин.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти шундан иборатки, ТТ спектроскопиясининг юқори вакуумли қурилмаси модернизация қилинди, электрон нурланиш энергияси $E=1$ кэВ га оширилди, масс спектри ёрдамида иккиламчи кластердаги нуқсонларни аниқлаш ва сиртда ҳосил бўлган нуқсонларни аниқлаш муаммоларини ҳал қилишда ёрдам беради. Кенг ҳудудли кристаллар детектор сифатида - термолюминесцент ва термоэмиссион дозиметрларда, люминесцент нурланиш кўрсаткичларида, маълумотни ёзиб ва сақлаш воситаларида, нано, опто ва микроэлектроникада, лазер технологиясида, р-н бирикмаларини яратишда ва бошқа амалий соҳаларда қўлланилиш имконини беради.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.

Кенг ҳудудли кристаллар сиртида ҳосил бўлган нуқсонлар ва физикавий жараёнларни ўрганиш бўйича олинган натижалар асосида:

кремнийни 400-1000°C ҳароратда сирт оксидланиш жараёнларини ўрганишда олинган тажриба натижалари 2012-2013 йилларда бажарилган №АЕ4-ФА-0-19520 рақамли “Қайта кристаллизация усулида техникавий кремнийни тозалаш жараёнларини тадқиқ қилиш” номли амалий ва 2014-2015 йилларда бажарилган №ЁФ3-ФА-0-25046 рақамли “Қайта кристаллаштиришда киришмаларнинг чегараланган эрувчанлик ва сегрегация коэффициентига ўзаро таъсири” номли фундаментал лойиҳаларда фойдаланилган (ЎзР Фанлар академиясининг 2020 йил 4 октябрдаги 2/1255-

2649-сонли маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш эрувчанлик ва сегрегация коэффициентини юқори аниқликда ўлчаш имкониятларини яратган;

кремний кристаллини ионлар билан имплантация қилиш ва цинк оксиди кристали сиртидаги заряд йиғилиши билан боғлиқ экспериментал жараёнларда олинган натижалар қувват ва ёруғлик диодларини ишлаб чиқиш самарадорлигини оширишда қўлланилган (“ЎЗЭЛТЕХСАНОАТ” уюшмасининг 2020 йил 1 августдаги 04-4/1054-сонли маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш қувват ва ёруғлик диодларини ишлаб чиқиш жараёнида маҳсулот самарадорлигини ошириш имкониятларини яратган;

кремний сиртининг гибридланиш ва оксидланиш таъсирини ўрганиш жараёнида олинган экспериментал ва назарий натижалар кейинги тадқиқотларда юқори импакт факторли хорижий журналларда келтирилган металл нанозаррачалардан ташкил топган бошқа намуналарни қўлланилди (Materials 2022, V. 15, Scopus, IF – 3.78; Energy Technology 2022, V.10, Scopus, IF – 4.149; Physica B Condensed Matter 2022, V.639, Scopus, IF – 2,988). Илмий натижалардан фойдаланиш металл ва оксидли кейинги авлод термоэлектрик, фотоволтаик қуёш батареялари, оптоэлектрон қурилмаларига ракобатчи бўладиган икки ўлчовли яримўтказгичларни синтез қилиш ва башорат қилиш усулларини ишлаб чиқиш имконини берди.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Тадқиқот натижалари 9 халқаро ва республика конференцияларида муҳокама қилинган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзусида олинган натижалар буйича 24 та илмий иш тақдим этилган бўлиб, шундан 14 та илмий мақола, шу жумладан 6 та чет эл ва 8 та мақола Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси томонидан докторлик диссертациянинг асосий илмий натижаларини чоп этишга тавсия этилган илмий журналларида чоп этилган.

Диссертациянинг хажми ва тузилиши. Диссертация иши кириш қисми, бешта боб, хулоса ва 236 та адабиётлар рўйхатидан иборат, 53 расм ва 7 жадвални ўз ичига олган 207 бетлик матнни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурияти асосланган, тадқиқотнинг мақсади, вазифалари, объекти ва предмети шакллантирилган, тадқиқотнинг Ўзбекистон Республикаси фан ва технологияларини ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мослигини кўрсатиб берилган, тадқиқотнинг илмий янгилиги, олинган натижаларнинг назарий ва амалий аҳамияти очиб берилган, натижаларнинг жорий қилиниши, нашр этилган илмий ишлар ва диссертация тузилиши ҳақида маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг биринчи бобида **"Кенг худудли кристалларда нуқсон пайдо бўлиши бўйича тажриба ва назарий ишларнинг шарҳи"** сирт-қаттиқ хажм ўртасидага физик жараёнларга нурланишнинг таъсири ҳақида асосий маълумотлар келтирилган, шунингдек қуйидагилар муҳокама қилинади: электрон ва ионлар билан таъсирлашганда ион кристалларида сиртда ҳосил бўладиган нуқсонлар; кенг худудли оксид материалларнинг сирт нуқсонлари; рух оксиди кристаллидаги сирт нуқсонлари. Адабиётлар шарҳи асосида, кенг худудли кристаллар муҳим илмий ва амалий аҳамиятга эга бўлган ноёб физик хусусиятларга эга деган хулосага келинган. Бу кенг худудли кристалл сирт нуқсонларини ўрганиш долзарб муаммо эканлигини асосланган.

Иккинчи бобида **"Ўлчов методикаси ва тажриба ускуналари"** асбоблар, ТТ спектроскопия усули, SRIM ва тажриба тадқиқот усуллари ва ишлатилган намуналар тавсифланади.

Синовларда сапфир (Al_2O_3) тагликларига лазер ёрдамида ўстирилган тоза ZnO поликристаллари ва монокристаллари, шунингдек литий фторид ва кремний оксиди кристаллари ишлатилган. Ушбу кристалларнинг танланиши тасодифий эмас: уларнинг барчаси кенг худудли бўшлиққа эга ва бир-бирларига нисбатан ионли, ионли-ковалент боғланишлар билан ажралиб туради, бу бизнинг тадқиқотимиз шароитида сиртда нуқсон пайдо бўлишини ўрганишимизга имкон беради. Ўрганилган намуналарнинг қалинлиги ~ 1 мм, кўндаланг ўлчамлари $\sim 1 \times 1$ см ва кристаллографик ўлчови (111) бўлган текис тагликлардан иборат.

Электронлар ва ионлар таъсири остида кенг худудли кристалларнинг сиртида нуқсон ҳосил бўлишини ўрганиш учун юқори-вакуумли ТТ спектроскопияси методидан фойдаланилган.

Модернизация қилинган ва янги услублар асосида ишлаб чиқилган ТТ спектроскопияси тажрибаларни 1 нА ток кучи ва 0-1000 эВ энергияга эга бўлган электронлар билан нурлантиришдан сўнг намуналар сиртида нуқсонларни қайд этиш ва ўрганиш имконини беради.

Чангланиш жараёнида нуқсонларнинг ўрнини аниқлаш учун молекуляр динамика усули - SRIM дастури ёрдамида баъзи тажрибалар ўтказилди.

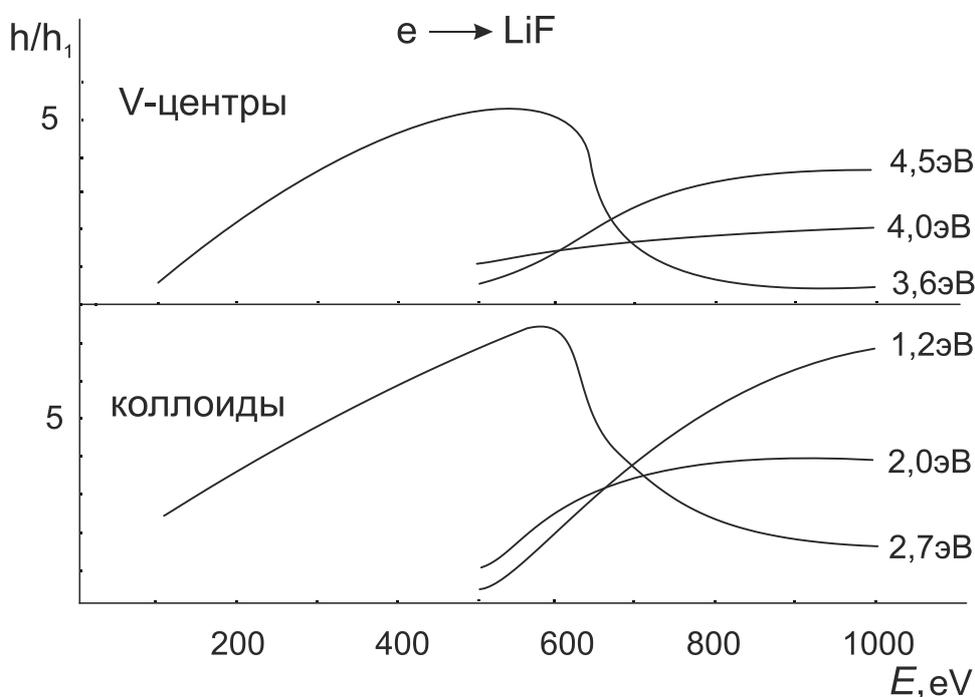
Учинчи боб, **"LiF кристалларини электронлар ва ионлар билан нурланиш натижасида ҳосил бўладиган нуқсонлар ва кластерларнинг**

шаклланиши" деб аталган бўлиб, турли хил усулларни қўллаган ҳолда электронлар ва ионлар билан нурланиш пайтида LiF кристаллари сиртида нуқсонлар ва кластерларнинг шаклланишини тажриба ва назарий асосида ўрганилган натижаларга бағишланган.

LiF таглигини энергияси 100-800 эВ ва дозаси 10^{14} эл/см² гача бўлган электронлар билан нурлантириш пайтида ТТ спектрларининг дозага ва энергияга боғлиқлик натижалари олинган.

Энергияси 100 эВ ва дозаси 10^{14} эл/см² бўлган электронлар билан нурлантириш спектр фонида коллоид ва фтор ўз ичига олган агрегатларнинг кенг чўққиларининг пайдо бўлишига олиб келади. Шунингдек, LiF сиртини электрон нурлантиришнинг энергияга боғлиқлигини таққосланда кузатилган жараёнларнинг СФ-46 спектрофотометрида бажарилган иш билан ўхшашлиги ва мослиги аниқланди. LiF сиртини ТТ спектри чўққиларининг энергия билан боғлиқлиги (1-расм) шуни кўрсатдики, 600 эВ электрон энергиясида кластер ва агрегатларнинг жадал шаклланиши бошланади.

Кўрганингиздек, электрон энергиясининг ошиши билан коллоидларнинг баландлиги (100 дан ортиқ литий атомлари, 2,7 эВ) пасаяди, аммо йўқолмайди. Ва кичик ўлчамдаги литий кластерлари (2,0 ва 1,2 эВ) ҳосил бўлади ва уларнинг эса баландлиги ошади. Бу ҳолат V -марказлари учун ҳам такрорланади (1-расм). Шундай қилиб сирт, энергияси 600 эВ бўлган электронлар билан нурланганда, кристалл сиртида чангланиш бошланади. Сиртда коллоидларнинг ороллари ва ҳар хил ўлчамдаги фторли агрегатлар ҳосил бўлади.

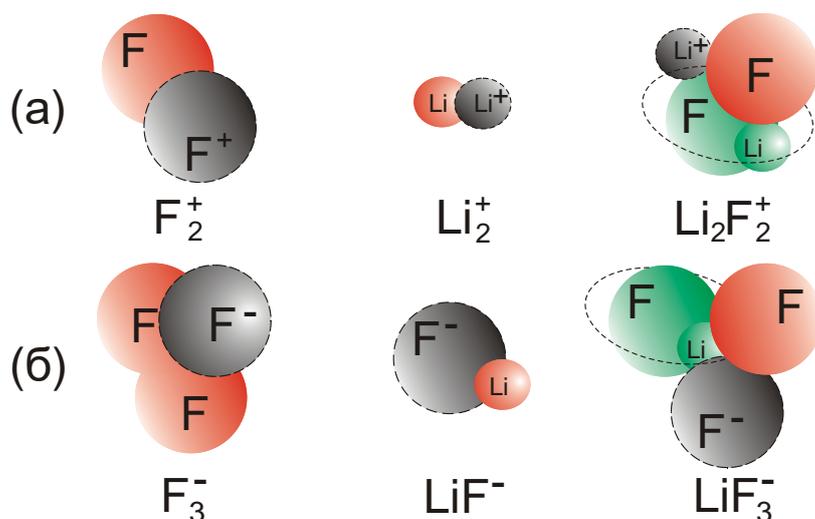


1-расм. LiF ТТ спектри чўққиларининг энергияга (100-1000 эВ) боғлиқлиги

LiF таглигини энергияси 1,0 кэВ бўлган Cs⁺ ва Cl⁻ ион нурлантиришида ТТ спектрларининг дозага боғлиқлик натижалари келтирилган. Олинган

спектрлар орасидаги фарқ кўрсатилди: Cl^- ионлари билан нурланганда сиртда заряд ҳосил бўлмайди ва HCl чўққиси H_{Cs} чўққисидан деярли уч баравар юқори. Такрорий тадқиқотлар шуни кўрсатдики, аслида хлор билан нурлантиришда HCl чўққисининг баландлиги H_{Cs} чўққисига нисбатан фон спектрига қараганда деярли уч баравар юқори. Ушбу тажрибада фақат ион массаси ва зарядларнинг кутуби ўзгарган, шуни кўриш мумкинки, кутуб чўққи баландлигига таъсир қилмайди. Бундай катта фарқ фақат бомбардимончи ионнинг массасига боғлиқлиги аниқланди.

Шунингдек бу бобда, мусбат Cs^+ ва Cl^- ионлари билан LiF кристаллини бомбардимон қилиш пайтида чангланган иккиламчи мусбат ва манфий ионлари чиқиши тўғрисида маълумотлар берилган. LiF кристаллини Cs^+ ва Cl^- ионлар билан нурлантириш тадқиқотлари натижаларига кўра, агар анион комплекслар бомбардимон пайтида панжара ичида фтор F_2 , F_3 , F_4 ионлари пайдо бўлса, мусбат фтор ионлари кўринишида қайд қилинган оралик нуқсонлар мавжуд деган хулосага келинади. Агар коллоид марказлар ҳосил бўлса, унда чангланиш пайтида Li_2 , Li_3 , Li_4 туридаги мусбат ёки манфий ионлар қайд этилиши керак бўлади. Иккиламчи мусбат кластерларнинг таҳлили шуни кўрсатадики, ҳар бешта кластернинг учтасида, бомбардимончи ион энергиясини бериши натижасида, кристалл сиртида ҳосил бўлган нуқсонлар чангаланган кластерларнинг хажмида мавжуд (2.а-расм).



2-расм. LiF кристаллининг ионли бомбардимони пайтида сиртдан чиқадиган иккиламчи кластерлардаги нуқсонларнинг тузилиши ва мувозанат йўналиши (а - мусбат, б - манфий кластерлар)

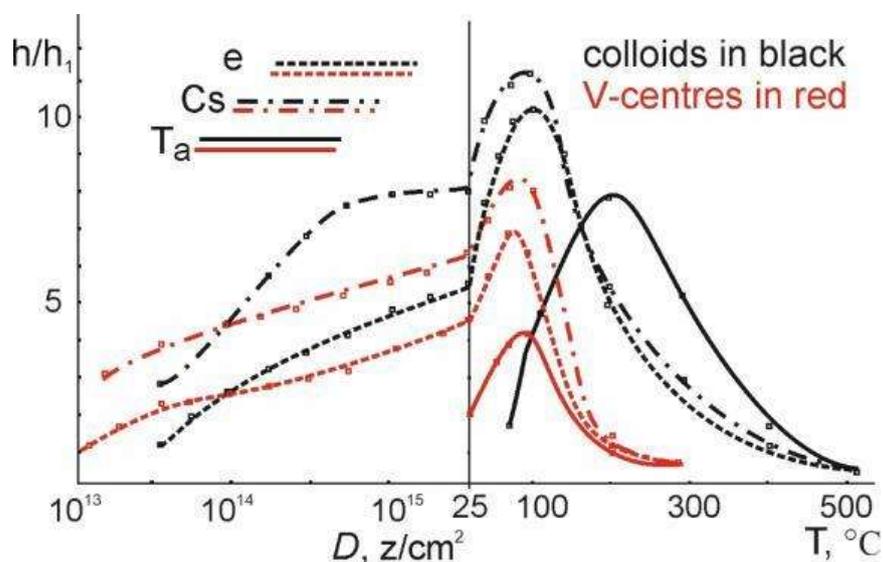
Аниқланишича, ҳар бешта манфий зарядланган кластерларнинг ҳар тўртида ион кристаллини бомбардимон қилиш натижасида ҳосил бўлган бириктирилган сирт нуқсонлари мавжуд. Бошқа барча ҳолатларда иккиламчи манфий кластерлар оралик, коллоид ва V марказлари томонидан ҳосил бўлади. Шундай қилиб, LiF ионли кристаллидан чангланган зарядли иккиламчи маҳсулотларининг асосий қисми нуқсонлардан иборат бўлиши мумкин.

ТТ спектрлари маълумотларини текшириш ва таққослаш учун SRIM

дастурида LiF сиртида бўш жойлар, киритилган ва оралиқ нуқсонларни ўрганиш амалга оширилди. LiF сиртида бўш жойларни шакллантириш, критилган ва оралиқ нуқсонларни ўрганиш хар хил массали бомбардимончи ионлар билан амалга оширилди. Аниқланишича, бирламчи ион массасининг камайиши билан киришма нуқсонларнинг сони сиртда ортади, аммо кристаллнинг хажмига нисбатан 100 А атрофида тақсимланади. Сиртга йиғилган киришма сезий ионлари умуман кузатилмайди. Шундай қилиб, ион қанча катта бўлса, у шунчалик чуқурроқ кристалл хажмига киради. Шу сабабли ионларнинг асосий қисми сиртда кузатилмайди, улар кристаллнинг хажмига жойлашади. Тадқиқотлар шуни кўрсатдики, бирламчи ионнинг массаси (мос равишда ион хажми) кўпайиши билан кристаллнинг хажмига қараганда сиртда кўпроқ бўшлиқлар ва оралиқ нуқсонлар хосил бўлади. Кичик массага эга бўлган ионлар учун киришма нуқсонларнинг сиртдаги тақсимоти кристаллнинг хажмига қараганда кўпроқ бўлади.

ТТ спектрларидан кўриниб турибдики, нурланишнинг юқори доза ва энергияларида литий фтор кристали юзасида коллоид марказлари билан бир қаторда нейтрал фтор атомлари тўпланиб боради. 3,6 эВ энергиясида аниқланган чўққилар - бу нейтрал фтор атомларининг сиртда тўпланишидир ва улар V-марказлари деб ҳам аталади.

3-расмда 3,6 эВ энергиясида V-марказларининг чўққиларининг нисбий интенсивлигининг дозага ва ҳароратга боғлиқлиги кўрсатилган.



3-расм. 3,6эВ энергиядаги V-марказлари чўққиларининг нисбий интенсивлигининг дозага ва ҳароратга боғлиқлиги

Расмдан кўриниб турибдики, V-марказларининг нисбатан юқори концентрациясини электронларга қараганда, ионлар билан нурлатиш натижасида хосил қилиш мумкин. Дозага боғлиқлик шуни кўрсатадики, барча ҳолатларда V-марказлари кристал юзасида 10^{14} заряд/см² дозада кузатилади, дозаси ошиб бориши билан нейтрал фтор атомларининг тўпланиши кузатилади ва бу уларнинг концентрациясининг ошишига олиб келади.

Адабиётдан билганимиздек, Н-марказининг якуний маҳсулоти нейтрал фтор ва сиртдаги бўш жойлардир. Улар барқарор ва ҳаракатчан. V-марказларини 100°C ҳароратда қиздириш уларнинг сиртдаги концентрациянинг ошишига олиб келади, бу эса бундай марказларнинг хажмдан сиртга чиқишини, шунингдек V-марказларининг ҳаракатчанлигини ошишини кўрсатади. Расмдан кўришиб турибдики, V-марказларининг ҳароратни 200°C дан юқори даражага кўтарилиши уларнинг сиртдаги концентрациясининг пасайишига олиб келади, бу эса сиртдан десорбцияни англатади. 400-500°C дан юқори ҳарорат фторнинг тўлиқ десорбцияланишига олиб келади.

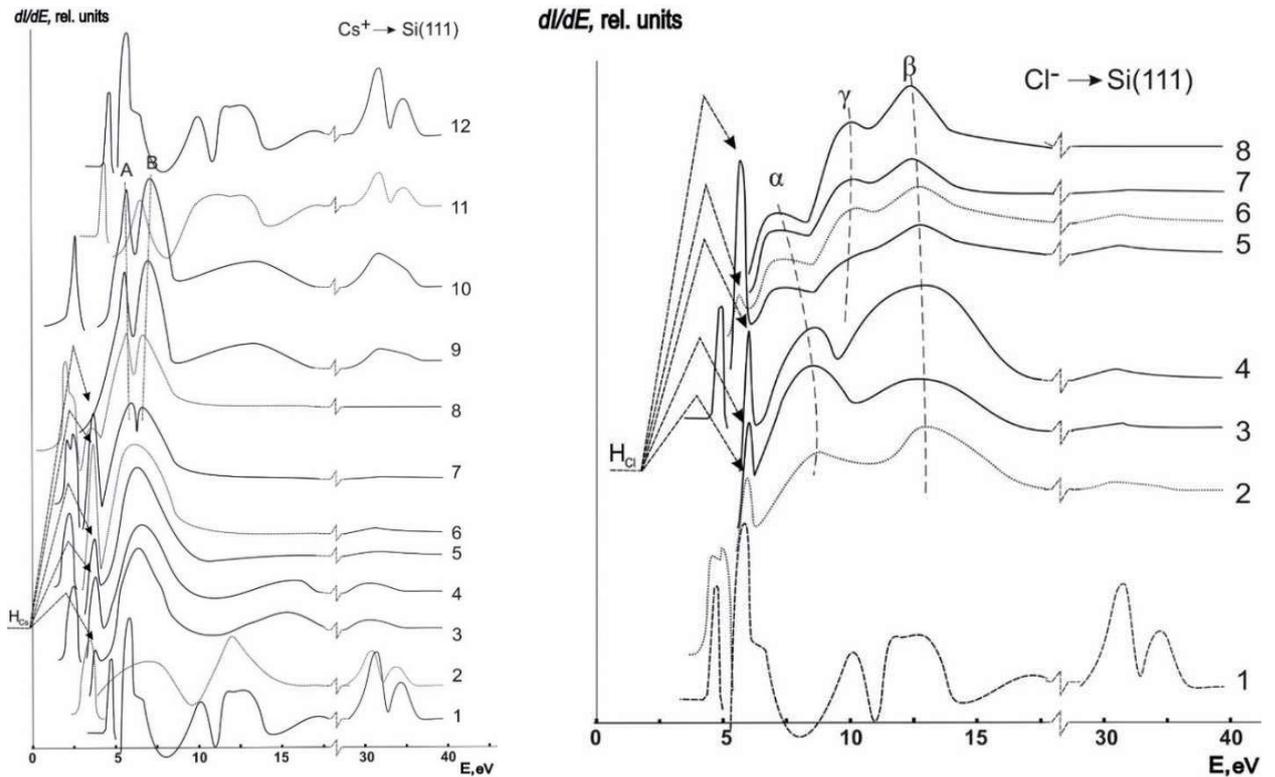
Тўртинчи боб “**Si(111) ва SiO_x кристаллари сиртини электронлар ва ионлар билан чанглантирилганда нуқсонлар ва кластерларнинг ҳосил бўлиши**” деб аталган бўлиб, Si(111) ва SiO_x кристаллари электрон ва ионлар билан нурлантирилганда сиртда нуқсонлар ва кластерларнинг пайдо бўлишини тадқиқ қилишнинг тажрибавий ва назарий натижалари муҳокама қилинади.

Si(111) ва SiO_x кристалларини электронлар ва ионлар билан нурлантириш пайтида сиртидан олинган ТТ спектрлари натижалари келтирилган. Бунда кремний сиртини тозалаш ва оксидланиш жараёнида сирт ҳолатларининг, бўшлиқларнинг, оралиқ ва киришма нуқсонларининг роли ва таъсири ўрганилган. Хона ҳароратида газ адсорбцияси жараёнида Si(111) намунасининг ТТ спектрлари ва чиқиш иши қийматларининг натижалари олинган.

4-расм пастки қисмида кремнийни 2,5 кВ энергияли манфий хлор ва мусбат цезий ионлари билан нурлантириб олинган ТТ спектрлари кўрсатилган. 4-расмдаги 1-спектр, 7×7 тузилишга эга бўлган тоза кремнийнинг ТТ спектрига мос келади. 2-эгри чизик кремний сиртини 2,5 кВ энергия ва 10¹³ ион/см² дозага тенг мусбат цезий ионлари билан бомбардимон қилинган ТТ спектрига мос келади.

Спектрдан кўришиб турибдики, бирламчи чўққи паст энергиялар томон силжийди, бу сиртнинг чиқиш ишининг пасайишини англатади, шу билан спектрнинг дифракция компонентининг баландлиги пасаяди (спектрнинг ўнг томони 30-40 эВ оралиғи). Дозанинг 10¹⁴ ион/см² га ошиши билан спектрнинг паст энергия томонида (эгрилик 3) 1,0 (H_{Cs}) ва 5.0 эВ энергияларида чўққилар пайдо бўлади. Шунингдек, кремнийнинг худудлараро ҳолатини кўрсатадиган 7.0 ва 10.0 эВ энергиясидаги чўққилар йўқолади. Дозанинг 10¹⁵ ион/см² га ошиши билан (эгрилик 4) 1,0 эВ энергиядаги (H_{Cs}) чўққисининг интенсивлиги ошади ва тоза кремнийга хос ТТ спектри йўқолади, бу эса сиртнинг чангланаётганини кўрсатади. 1,0 эВ чўққи цезийнинг сиртга киритилган киришма нуқсонларига тўғри келиши мумкин, чунки чўққининг энергия даражаси кремнийнинг тақиқланган худудида жойлашган. Дозани янада ошириши фақатгина ушбу чўққининг ошишига олиб келади, қолган спектрнинг тузилиши ўзгармайди. 100, 200°C ҳароратда қиздириш (5 ва 6-эгриликлар) 1,0 эВ энергиядаги энг юқори чўққининг ўсишига олиб келади, бу эса сиртнинг кристалл тузилишини бузилаётганини тасдиқлайди. Бундай ҳароратларда ҳосил бўлган нуқсонлар хажмдан сиртга тарқалади. 200°C

хароратда сиртнинг чиқиш иши энг кам даражага эришганлиги кузатилади, бу кремний сиртида доимий цезий қатлам ҳосил бўлишини кўрсатади. Шунингдек, 4-расмда кремнийни 2,5 кэВ энергияли манфий хлор ионлари билан нурлантириш пайтида олинган ТТ спектрлари кўрсатилган. 4-расм, 1-эгрилик 7x7 тузилишга эга бўлган тоза кремнийнинг ТТ спектрига мос келади. 2-эгрилик энергияси 2,5 кэВ ва дозаси 10^{13} ион/см² бўлган хлор ионлари билан нурлангандан кейинги кремний сиртининг ТТ спектрига тўғри келади.



4-расм. Кремнийни (Cs ва Cl) ионлар билан бомбардимон қилиш ва кейинги қиздириш ТТ спектрлари

10^{13} ион/см² дозада хлор билан нурлантириш спектридан кўриниб турибдики, бу кремний сиртини қайтариб бўлмайдиган аморфизациясига олиб келади (30-40 эВ ТТ спектрининг диффракция компонентаси йўқолди). 0,8 эВ энергияда чўққи пайдо бўлади. Бирламчи чўққининг иккига ажралиши ва унинг паст энергияга томонга эмас, балки юқори энергия томон силжиши кузатилмоқда, бу кремний сиртининг чиқиш ишининг ўсишини кўрсатади. α ва β кенг чўққилар ҳосил бўлади. 0,8 эВ энергия атрофидаги чўққи кремний сиртида (H_{Cl}) киритилган хлор (киришма) нуксонларига тўғри келади. Бу чўққининг 10^{14} ион/см² дозада янада ошишига, (3 эгри чизик) олиб келади ва ТТ спектридаги, α ва β чўққиларининг интенсивлиги ҳам ошади. 10^{15} ион/см² дозада нурлантириш H_{Cl} , α ва β нинг баландлиги ортишига олиб келади (4-эгрилик).

100°C хароратда қиздирилганда H_{Cl} нинг энг юқори баландлиги дарҳол икки баравар кўпаяди. Бу намуна сиртида оралик хлор атомларининг чиқишидан далолат беради, шунингдек, α ва β чўққилари баландлигининг

пасайиши ва уларнинг паст энергиялар томон силжиши сирт ҳолатларининг эгилишини кўрсатади. Шунингдек, 11,0 эВ энергиясида γ чўққиси ҳосил бўлади. Қиздириш ҳароратининг 100-400°C га кўтарилиши, α , β ва γ чўққиларнинг баландлигини ошишига олиб келади. 0,8 эВ энергиядаги чўққи, яъни киришма нуқсонлар тўлиқ куйиб битади (5, 6, 7, 8 эгри чизиклари). Кўриниб турибдики, манфий хлор ионлари билан нурлатилганда, кремний сирти оксидланади, сезий ионлари билан бўлса, кремний сирти тозаланади. Иккала ҳолатда ҳам қиздириш кузатилган таъсирни кучайтиради. Турли хил ионлар билан нурлантириш остида ўтказилган тадқиқотлар шуни кўрсатдики, сирт ҳолатининг тузилиши нафақат дозага, энергияга, ҳароратга, балки бирламчи ионнинг зарядининг массаси ва қийматига ҳам боғлиқ.

Бу бобда ТТ спектрларининг бирламчи сезий ионларининг энергиясига боғлиқлиги ўрганилган ва Si(111) кристалларини ионлар билан чангланишида нуқсонлар ва кластерлар ҳосил бўлиши натижалари келтирилган. Қуйидагилар аниқланган: бирламчи ионлар энергиясининг ортиши билан сиртдаги бўш жойлар ва киришма нуқсонларнинг сони ортади, бу эса сирт бузилишига ва спектрдаги чўққиларнинг пасайишига олиб келади; қиздиргандан сўнг, нуқсонларни ҳажмдан намунанинг сиртига кўчириш бошланади, бу эса сиртнинг текисланишига ва чиқиш ишининг пасайишига олиб келади.

Шундай қилиб, бирламчи ионлар энергиясининг ортиши билан кластер ионлари чиқишининг ўсиши, сиртда бўш жойлар ва киришма нуқсонлар сони сезиларли даражада ошиши ва кристалл панжарада жойлашган атомлар оралик нуқсонга айланишади ёки бошқа атомлар яқинидаги бўш жойларни пайдо бўлишига олиб келади, бу эса кластер ҳосил бўлиш жараёнига ҳисса қўшади.

ВИМС ва ТТ спектроскопияси маълумотларини текшириш ва таққослаш учун SRIM дастурида молекуляр динамика усулидан фойдаланиб, кўшимча тадқиқотлар ўтказилди. Кремний сиртида бўш ўринларнинг шаклланиши, оралик ва киришма нуқсонлар пайдо бўлишининг бомбардимончи ионнинг массасига боғлиқлигини ўрганиш учун тадқиқотлар ўтказилди. Катта массали ионлар, кристаллнинг ҳажмига қараганда сиртда нуқсонларни кўпроқ ҳосил қилади, улар сиртнинг қирилишига таъсир қилади. Кичик массали ионлар билан бомбардимон қилинганда, бўшлиқларнинг зичлиги ва сиртдаги оралик нуқсонлар одатда кам бўлади. Шунинг учун, паст энергияли ионлар билан сиртни бомбардимон қилишда кичкина сонли кластер ионлари кузатилади.

Тадқиқотлар шуни кўрсатдики, бирламчи ионнинг массаси (ионнинг ўлчамлари) ошиши билан кристаллнинг сиртида ҳажмига нисбатан кўпроқ бўшлиқлар ва оралик нуқсонлар пайдо бўлади. Энг кичик массага эга бўлган ионлар учун киришма нуқсонларнинг тақсимланиши кристаллнинг ҳажмига қараганда сиртда кўпроқ.

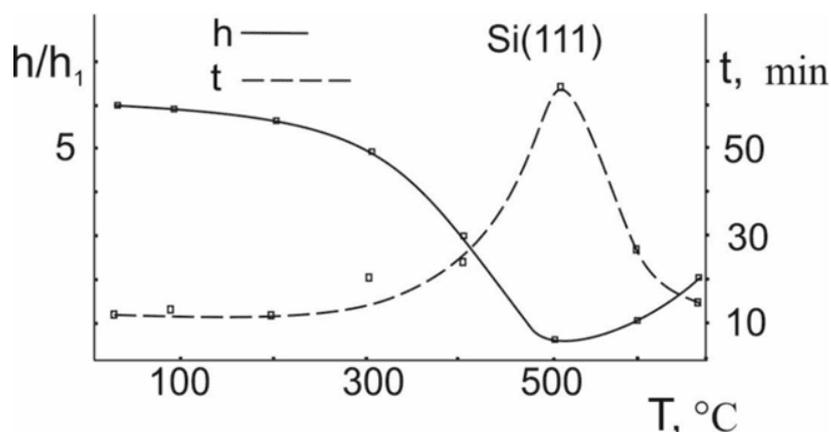
Бир вақтнинг ўзида кремний сиртидан ТТ ва ИИМС спектрлари ҳам ёзиб борилган. Агар ИИМС ва ТТ спектрларини диққат билан таққосласак, 600°C дан кейин қиздириш, сиртда иккиламчи углерод ионларининг кўпайиши бошланади. Кремний кристалларининг тозаланмаган, оксидланган ва тоза сиртларининг ТТ ва иккиламчи ион масс спектрлари билан таққосланганда,

600°C дан юқори қиздиришда киришма углерод атомларининг ҳажмдан сиртга чиқиши аниқланди, ва паст ҳароратларда углерод сиртда жуда ҳам паст зичликда кузатилади. Бундан келиб чиқадики, кремний сиртини 600°C дан паст ҳароратларда углероддан тозалаш мумкин бўлади. Бундан ташқари, кремний кристаллини 1000°C ҳароратгача қиздириш сиртни углерод, кислород ва унинг бирикмаларидан тозаланишига олиб келмайди.

Юқорида айтиб ўтганимиздек, ҳар сафар тажриба ўтказишдан олдин ҳар сафар кремнийни юзасини ион нурлантириш ва қиздириш орқали оксиддан тозаланган ва 7x7 тузилишга эга бўлган ТТ спектрини олинган. Олдинроқ айтиб ўтилганидек, ТТ спектрининг паст энергия томонида, 0,5-1,0 эВ энергиялар оралиғида бўлган баланд чўққи пайдо бўлади. Таглик ҳарорати 100°C дан хона ҳароратигача пастга тушганда, унинг зичлиги кўтарилди бошлайди. Бундан ташқари, чўққининг баландлиги оксидланиш ва ҳароратга тескари пропорционал бўлиб, бу унга сирт хусусиятларини беради.

Бу чўққи икки йўналтирилган бўшлиқдан иборат кремнийнинг элементар панжарасини, яъни кремний сиртидаги кислороднинг бўшлиқларини кўрсатади. Шундай қилиб, кремний сиртида бўшлиқ (кислород етишмайдиган марказ) борлиги аниқланди ёки уни НВОНС марказ деб ҳам аташади. Кислород кремний сиртига адсорбцияланганида, бу марказларнинг баландлиги сезиларли даражада пасаяди.

Кремнийнинг ТТ спектридаги 0,5 эВ чўққисини ўрганиш бизга қуйидаги ҳарорат ва кинетика боғлиқликни олишга имкон берди (5-расм). Si (111) 7x7 тузилишга эга тоза кремний олиш учун кремний сиртини цезий ионлари билан нурлантиргандан сўнг, 700°C ҳароратда қиздирилади. ТТ спектрини олгандан сўнг, барқарорлашув амалга оширилади ёки, бошқача қилиб айтганда, ҳар хил ҳароратда бир соат давомида пассивация қилинди. Кейин ТТ спектри яна қайд этилади ва 0,5 эВ чўққининг интенсивлиги кузатилади. Кейин, ҳеч қандай ҳаракатларсиз, тоза кремний спектри кузатилди. Биз қуйидаги маълумотларни олдик:



5-расм. Кремнийнинг ТТ спектридаги 0,5 эВ чўққисини ҳарорат ва кинетикага боғлиқлиги

Сирт пассивацияси 700°C ҳароратда ўтказилди. 15 дақиқа давомида, тоза кремний сиртининг ТТ спектри ўзгармади. Кейин сирт 600°C ҳароратда

пассивация қилинди. Бунда тоза кремний сиртининг спектри 25 дақиқа давомида ўзгармади. Кейин сирт 500°C ҳароратда пассивация қилинди. Бундай ҳолда, кремний юзаси бир соат давомида тоза ҳолатини сақлаб қолди. Тоза кремний юзасида 500°C дан паст ҳароратларда қолдиқ газларнинг 10 дақиқага ичида адсорбцияланиши кузатилди.

Шундай қилиб, ТТ спектрида аниқланган 0,5 эВ чўққиси ҳақиқатан ҳам кремний кристалли юзасида жойлашган нуқсонларга тегишли. Кўринишидан, унинг кремний юзасида концентрацияси газнинг адсорбция тезлигига таъсир қилади. Кремний юзасидаги нуқсонлар вакуумда қолдиқ газ атомлари билан кимёвий реакция учун шароит яратади. Бундай нуқсонларнинг хусусиятларини кўпроқ аниқлаш учун яримўтказгич-оксид интерфейсида кўшимча тадқиқотлар ўтказиш талаб этилади.

Бешинчи боб **“ZnO кристаллари сиртини электронлар билан нурлантирилганда нуқсонлар ва кластерларнинг ҳосил бўлиши”** деб аталган бўлиб, ZnO кристалларини электрон билан нурлантирилганда сиртда нуқсонларнинг пайдо бўлишини тадқиқ қилишнинг тажрибавий натижалари муҳокама қилинади.

Рух оксиди поли ва монокристалларининг ТТ спектрларида (6,а-расм) 3,5 эВ энергия оралиғида чўққиларнинг (γ -чўққиси) пайдо бўлиши ZnO нинг валентлик электронларини ўтказувчанлик ҳудудига ўтиши билан боғлиқ бўлган оралиқ бўшлиқни кўрсатади. ZnO поликристаллида 1,8-2,0 эВ энергиядаги кенг чўққилар (β -чўққиси) намунанинг сиртида оралиқ кислород атомларининг тўпланиши аниқланган.

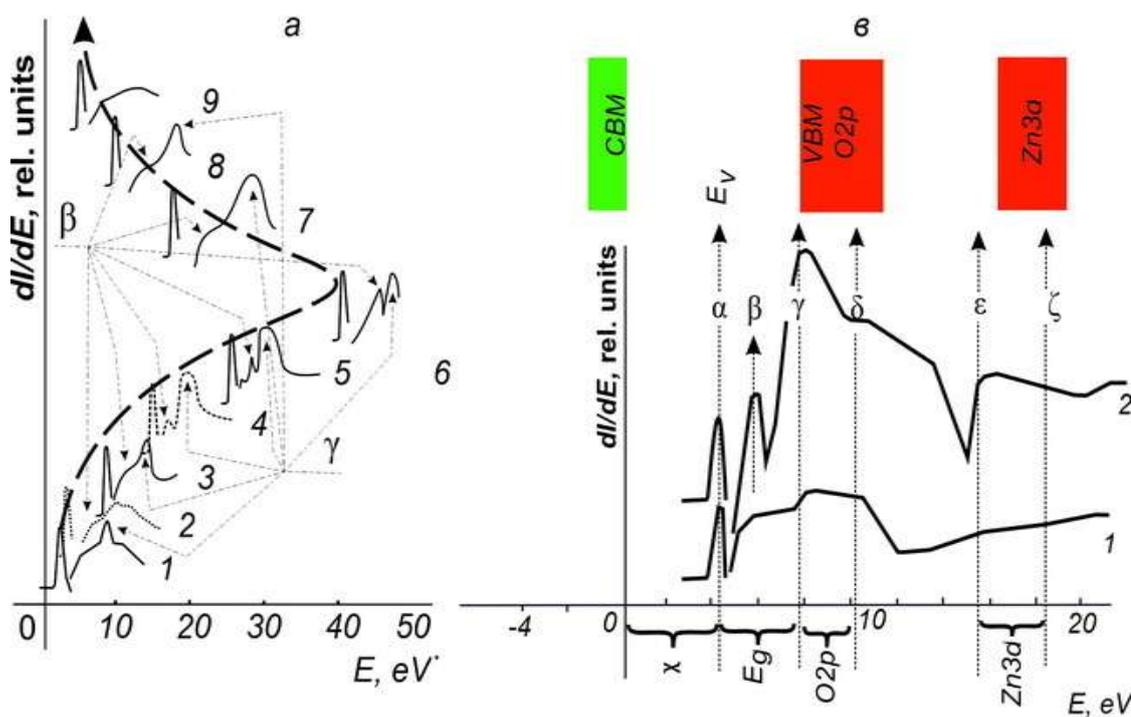
Икки кристалли ТТ спектрларининг таҳлили шуни кўрсатадики, поликристаллда электронларнинг сочилиши туфайли чўққиларнинг баландлиги жуда заифлашади. Монокристалл ZnO нинг ТТ спектридаги 8 эВ энергиядаги чўққиси (δ -чўққиси) ZnO нинг (0001) қутб йўналишига эгалигини ва сирт чегараси кислород атомлари билан якунланишини кўрсатади.

ZnO поликристаллининг ТТ спектрида 1,8-2,0 эВ энергия оралиғидаги кенг чўққилар намуна сиртида кислород бўшлиқлари нуқсонларининг тўпланишини кўрсатади. Монокристалл намунасининг ТТ спектрида бу нуқсонларнинг тор чўққиси кузатилади, яъни бу нуқсонларининг камлигини кўрсатади.

Шу билан биргаликда электронлар билан нурлантириш пайтида рух оксиди поли ва монокристаллари сиртида заряд ҳосил бўлиши муҳокама қилинади. Сирт ҳолатларни ўрганиш жараёнида яримўтказгичлар ва металл оксидларни (ZnO, SiO₂, CuO) паст энергияли бирламчи электронлар билан нурлантириш пайтида сиртда кучли заряд йиғилиши аниқланган.

6,в-расмда ZnO ТТ спектрларининг энергияга боғлиқлигининг графиги келтирилган. Шунингдек, 1 эгри чизиқ 2, 4, 6, 8, 12 ва 14 эВ энергияларида бир неча чўққиларнинг заиф шаклланганлигини кўрсатилган. Спектрдаги асосий чўққилар α , β , γ , δ ҳарфлари билан белгиланган, ТТ спектридаги 2,0 эВ чўққи β , нурлантиришдан олдинги нуқсонлар - ZnO қатламларида кислород бўшлиқларининг мавжудлигини кўрсатади. Жуда кўп ишлар ушбу 1,5-2,0 эВ бўлган спектрал минтақада жойлашган β чўққисини ўрганишга бағишланган.

Монокристалл ZnO нинг ТТ спектрида 8 эВ энергиядаги δ чўққи сиртда рух атомларининг мавжудлигини, бу эса (0001) ZnO намунасининг кутб йўналишини кўрсатади. 14 эВдан юқори энергиядаги кенг чўққилар дифракция нурларининг ўзгариши билан боғлиқ бўлиши мумкин. Шунингдек, $\sim 3,2$ эВ энергиядаги γ чўққи, экситон чўққисига тўғри келади, бу эса ўзаро Кулон таъсири натижасида ўтказувчанлик электронларининг валентли худуддаги тешиклар билан ўзаро таъсири натижасида ҳосил бўлади. Бундан ташқари, $E \geq 1$ эВ бўлган электронлар билан нурлантирилганда, бутун ZnO ТТ спектри ҳар доим юқори энергиялар (қалин чизиқли эгрилик) томонга силжийди, бу эса сиртда манфий заряд пайдо бўлишини кўрсатди. Электрон нурлантириш 5 эВ қадам билан амалга оширилди, ҳар бир рўйхатга олиш вақти $1,5 \cdot 10^{13}$ эл/см² ни ташкил этди. Бу доза сиртни заряд билан тўйинтириш учун этарли эди. Сиртдаги заряд жуда барқарор, чунки уни фақат юқори ҳароратда ($T > 300^\circ\text{C}$) қиздириш ёки юқори вакуумда бир неча соат (~ 3 соат) ичида олиб ташлаш мумкин эди. Манфий сирт зарядлари, эҳтимол кислород бўшлиқлари билан боғлиқ бўлиши мумкин. Биз биламизки, ZnO қисман ионли кристаллдир ва шунинг учун ундаги икки қатламли мусбат манфий зарядланган Zn ва O ионларидан ташкил топган.



Эгриликлар: 1- 400°C ҳароратда ишлов берилгандан сўнг рух оксиди монокристалларининг тозаланган сиртининг ТТ спектри; 2- энергияси $E=10$ эВ бўлган электронлар билан нурлантириш пайтида ТТ спектри; 3- $E=20$ эВ; 4- $E=50$ эВ; 5- $E=75$ эВ; 6- $E=115$ эВ; 7- $E=120$ эВ; 8- $E=130$ эВ; 9- $E=150$ эВ;

6-расм. ZnO кристаллининг электрон билан нурлантиришдаги ТТ спектрининг тuzилиши

2-эгрилик ZnO сиртининг 3 дақиқа давомида 10 эВ энергияли электрон

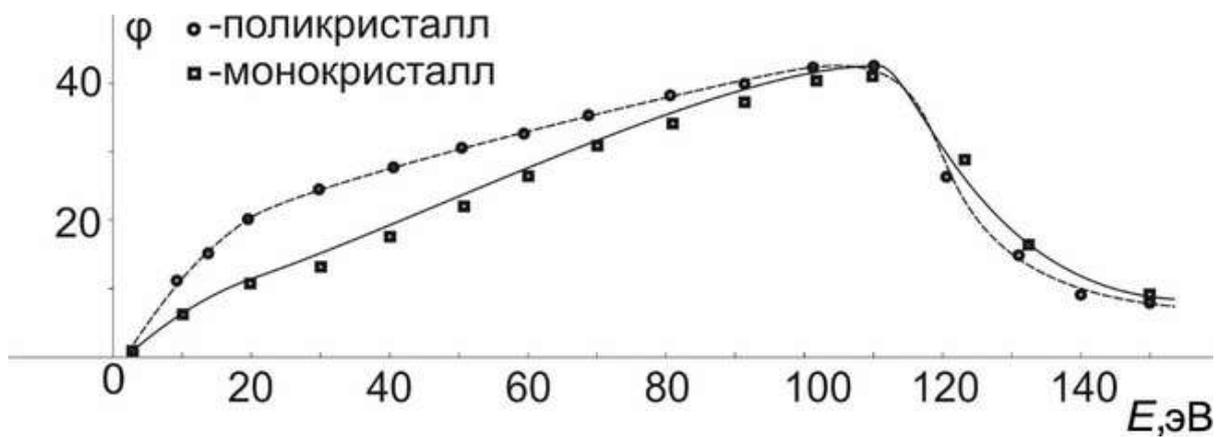
билан нурлантирилган ТТ спектрига тўғри келади, 2,5 эВ энергиядаги β чўққининг спектрдаги баландлиги пасаяди, бу бизнинг сиртдаги кислород бўшлиқлари ҳақидаги маълумотимизга мос келади, шу билан бирга, спектрнинг 3 эВга силжишини кузатиш мумкин. Бундан ташқари, 20 эВ (3 эгри чизик) нурлантириш энергиясида, β чўққининг спектрдаги баландлиги ўсади, ва шу билан бирга 8 эВ даги γ чўққи йўқолади. Шунингдек, 8 эВ энергиясида δ чўққининг ТТ спектридан йўқолиши рух атомлари сиртдаги зичлигининг пасайишини ва сиртда кислород атомларининг устунлигини кўрсатади (12 эВ энергиядаги ϵ чўққи). Бунда спектрнинг 12 эВга кескин сурилиши кузатилади. 4- эгри чизик ZnOни электрон билан 40 эВ нурлантиришида олинган ТТ спектрини кўрсатади. Спектрнинг силжиши 17 эВ ни ташкил қилади.

Ҳамма спектрларда экситон чўққиси - 3,2 эВ энергияда γ чўққи кузатилади. Сирт потенциалининг электрон энергиясига боғлиқлиги (қалин чизикли эгрилик) электронлар билан нурлантириш сиртда 43 эВгача зарядни пайдо бўлишига олиб келишини кўрсатмоқда.

Нурлантириш энергиясини 120 эВ ошириш сирт зарядларини 18 эВга кескин пасайтиради (7-9 эгрилик) ва бу энергияларда анион ва катион бўшлиқлари зичлигининг пасайиши, шунингдек сиртнинг чангланиши кузатилади. Сирт потенциалининг пасайиши, кислород ионларининг десорбцияси билан боғлиқ бўлиши мумкин, чунки бу энергияларда кислороднинг электрон туфайли десорбция бўлиш коэффиценти ортади ва бу ZnO сиртида манфий заряд қийматининг пасайишига олиб келиши мумкин. ZnO кристаллининг энергияси 130 эВ бўлган электронлар билан нурлантирилганда, сирт потенциали 10 эВга, 150 эВда 8 эВ га камаяди, кейинги энергияни 300 эВга ошириш спектрни ўзгартирмайди.

Рух оксиди кристаллари сиртида паст энергияли электронлар ёрдамида нуқсон ҳосил бўлишини ўрганиш шуни кўрсатадики, $1 < E < 20$ эВ нурлантириш энергиясида кислород бўшлиқларида электрон тўпланиши натижасида манфий заряд ҳосил бўлади. Шундай қилиб, сиртдаги манфий зарядлаш электронларнинг панжара ичидаги кислород бўшлиқлари томонидан сақлаб қолиниши натижасида юзага келади. $E \geq 20$ эВ энергияларида рух атомларининг такрорий ионланиши натижасида анион бўшлиқлар ҳосил бўлади. ZnO сиртида анион бўшлиқларини (~ 20 эВ) ҳосил қилиш учун энергия чегараси аниқланган.

$E > 120$ эВ дан юқори бўлган электронлар билан нурлантириш, балким кислороднинг чангланиши, ёки иккиламчи электронлар эмиссиясининг ошиши туфайли манфий сирт потенциалининг пасайишига олиб келиши мумкин. Тадқиқотда кузатилган ZnO кристалли зарядининг кинетик хусусиятлари унинг сиртини ўзгартириш ва электронлар учун тузоқлар бўлган нуқсонларнинг пайдо бўлиши билан боғлиқ. Манфий сирт зарядлари, кислород бўшлиқлари билан боғлиқлиги аниқланган.



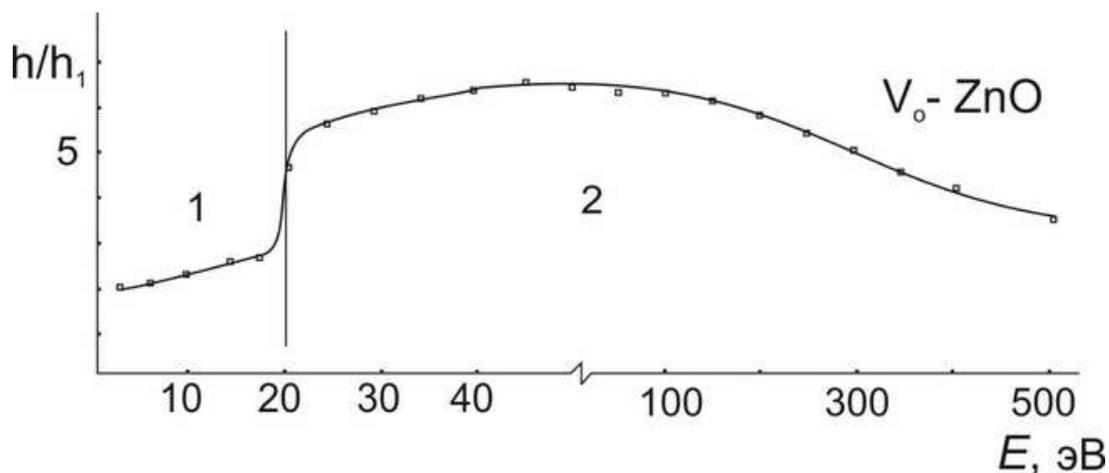
7-расм. ZnO поли ва монокристалларининг сирт манфий потенциалини нурлантирувчи электрон энергиясига боғлиқлиги

7-расмда рух оксиди кристали сиртининг манфий потенциали бирламчи электронлар билан нурлантириш энергиясига боғлиқлиги кўрсатилган. Кўриниб турибдики, сиртда тўпланган манфий зарядларнинг қиймати 43 эВ га кўтарилади, 120 эВ бошланғич электронларнинг нурлантириш энергияси пасайишни бошлаганда, лекин сиртдаги манфий потенциал йўқолмайди. Расмдан кўриниб турибдики манфий потенциал поликристалл ва монокристалл сиртида хар хил кўринишга эга. Бу сиртдаги атом ва кластерларнинг кристаллографик йўналишига боғлиқ.

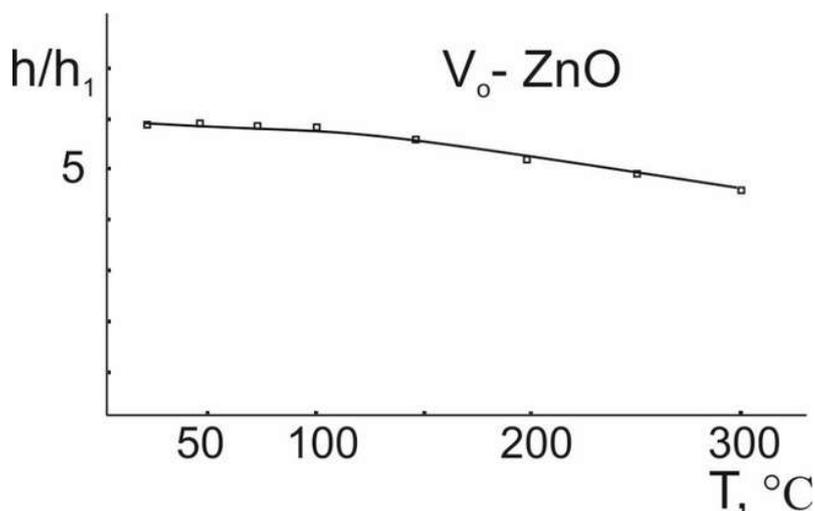
Олинган ТТ спектрларидан рух оксиди юзасида нурланишдан олдин хам бўшлиқлар борлиги кузатилган. Бу вакансияларнинг кинетикаси, энергия ва хароратга боғлиқлик хам ўрганилган.

8-расмда рух оксиди кристаллининг сиртидаги кислород бўш жойлари 2.0 эВ чўққисининг нисбий интенсивлигининг электроннинг нурланиш энергиясига боғлиқлиги кўрсатилган. Кўриниб турибдики, энергияси 20 эВ бўлган электронлар билан нурланишдан олдин бўш жой чўққиси интенсивлиги сезиларли даражада ошмаган. Бу цинк оксиди юзасида нурланишдан олдинги нуқсонлар мавжудлигини кўрсатади. Энергия 20 эВ га ошганда, интенсивликда тахминан 2 мартага кескин ошганлиги кузатилади, бу электрон нурланиш туфайли бўш жойларнинг шаклланиши билан боғлиқ.

Расмни 2 қисмга бўлиш мумкин: 1- минтақада рух оксиди юзасида аллақачон мавжуд бўлган вакансиялар (нурланишдан олдинги) кўрсатилган, бу эрда электрон энергияси вакансиялар ҳосил қилиш учун этарли эмас. Расмнинг 2 – қисмида (20 эВ энергияли электронлар билан нурлантиришда), нурланишдан олдин ва кейин ҳосил бўлган вакансиялар биргаликда иштирок этади. Кейинчалик электрон нурланиш энергиясининг ортиши кислород вакансияларини кўпайишига олиб келмайди, бу энергия рух оксиди кристалли сиртида кислород вакансиялари ҳосил бўлишининг чегарасини кўрсатади. Шундай қилиб, графикдан кўриниб турибдики, рух оксиди учун 20 эВ нурланиш энергияси сиртдаги нуқсонлар пайдо бўлишининг энг паст чегараси бўлиб, бундан паст энергияли электронлар электрон тешик жуфтликларини ҳосил қила олмайди.



8-расм. Электрон нурланиш остида ZnO кристаллининг сиртидаги хосил бўлган кислород вакансиялари - 2.0 эВ чўққиси нисбий интенсивлигининг энергияга боғлиқлиги



9-расм. ZnO кристаллининг сиртидаги хосил бўлган кислород вакансиялари - 2.0 эВ чўққиси нисбий интенсивлигининг ҳароратга боғлиқлиги

9-расмда ZnO кристаллининг юзасида 2,0 эВ чўққиси - кислород бўшлиқларининг нисбий интенсивлигининг ҳароратга боғлиқлиги кўрсатилган. Кўриниб турибдики, ҳарорат 300°C гача кўтарилганда ҳам 2,0 эВ чўққисининг интенсивлиги сезиларли даражада ўзгармайди, бу бўшлиқлар учун одатий ҳол эмас. Шунингдек 2,0 эВ чўққининг нисбий интенсивлиги кинетикасига кўра, ZnO кристаллининг юзасида кислород бўшлиқлари 4 соат ичида икки марта, 8 соат ичида беш марта камаяди, кейин бўшлиқларнинг кинетикаси деярли ўзгармайди. Бу сиртдаги кислород бўшлиқларининг концентрациясини камайтиришнинг ягона усулидир, аммо бўшлиқларни сиртдан бутунлай олиб ташлаш мумкин эмас. Шундай қилиб, графиклардан кўриниб турибдики, ТТ спектрида аниқланган 2,0 эВ чўққиси цинк оксиди кристалли юзасида кислород бўшлиқларига тегишли. Бу ҳарорат ва вақтга жуда барқарор.

ХУЛОСА

Тадқиқотлар асосида қуйидаги хулосалар чиқарилган:

1. ТТ спектроскопиянинг юқори вакуумли аппарати модернизация қилинди, бунда электронларнинг энергиясини 1000эВ га, ионларнинг энергиясини эса 3000эВ етқизиш имконияти яратилди ва ZnO, SiO_x/Si(111), LiF кристалларини электронлар ва ионлар билан нурланиш, чангланиш, нуқсон шаклланишини, чиқиш ишини ўзгартиришини, сиртнинг худудли тузилиши комплекс ўрганиш методикаси яратилган.
2. Биринчи марта ишқорий галогенид кристалларини нурлантириш жараёнида сирт чангланиши «Defect Mediated Sputtering» механизми туфайли содир бўлиши кўрсатилди. Чангланган иккиламчи кластердаги нуқсонларни масса спектрлари ёрдамида аниқлаш усули ишлаб чиқилди. Ишқорий галогенид кристаллари сиртида ҳосил бўлган нуқсонлар чангланиш жараёнини рағбатлантиради ва шу билан бирга улар иккиламчи ионлар билан бирга сиртдан чангланади.
3. Илк бор LiF кристаллини суб-кэВ электронлар ва ионлар билан нурлантирилганда нуқсонларнинг пайдо бўлиши ТТ спектроскопия усули ёрдамида ўрганилди. Бу ҳолатда, сиртда 3,6 эВ қўзғалиш энергиясида пайдо бўладиган V -марказларининг шаклланиши, яъни галоген атомларининг тўпланиши сифатида аниқланган нуқсонлар электрон ва зарба механизмлари асосида ҳосил бўлиши кўрсатилган.
4. Биринчи марта ТТ спектроскопияси асосида бирламчи ионлар массасининг ўзгаришига қараб LiF ва Si кристалида сирт нуқсонлари ҳосил бўлишининг физик қонуниятлари ўрганилди. Назария ва тажриба натижалари бирламчи ионнинг массаси ортиши билан кристалл сиртида хажмига қараганда кўпроқ бўшлиқлар ва оралиқ нуқсонлар пайдо бўлишини кўрсатди. Кичик массага эга бўлган ионлар учун киришма нуқсонларнинг сони кристалл сиртида хажмига нисбатан кўпроқни ташкил қилиши кўрсатиб берилди.
5. Илк бор кремний сиртини манфий хлор ионлари билан нурланиш пайтида эса оксидловчи хусусиятлари туфайли кремний сиртининг қизғин оксидланиши кузатилган.
6. Биринчи марта, ТТ спектроскопия усули билан кремний сиртида 0,5-1,0 эВ энергия оралиғида, кислородга дефицит марказлари мавжудлиги аниқланди ва уларнинг сиртдаги сони оксидланиш тезлигига таъсир қилиши кўрсатилди. Биринчи марта атом даражасида тоза кремний сирти 10 дақиқа давомида цезий ионлари билан нурлантирилиб 650°C ҳароратда қиздирилгандан кейин олинди, бунда қолдиқ газларнинг босими 10⁻⁹ Торр.га тенг.
7. Илк бор рух оксиди кристаллари сиртига паст энергияли электронларнинг таъсири ўрганилди: 1<E<20 эВ нурланиш энергиясида кислород бўшлиқларида электрон тўпланиши натижасида манфий заряд ҳосил бўлиши кўрсатилди.
8. 20эВ≤E≤120эВ энергия диапазолида ZnO кластерининг мусбат Zn⁺ ва манфий O⁻ ионлари боғларининг узилиши ҳисобига манфий зарядланишнинг

ортиши кузатилади, сиртнинг ташқи томонидан манфий кислород ионлари билан қопланганлиги ҳисобига, сиртда икки қаватли заряд ҳосил бўлишига олиб келади. Сиртдаги зарядларнинг кузатилган кинетик хусусиятлари электронлар учун тузоқ бўлган нуқсонлар билан боғлиқлиги аниқланди.

9. ZnO сиртини $E > 120$ эВ дан юқори энергияли электрон билан нурлантириш сирт потенциалининг пасайишига олиб келади. Тадқиқотда кузатилган ZnO кристалли сиртидаги заряднинг кинетик хусусиятлари сиртнинг тузилиши, морфологияси, кристалл кимёвий хусусиятларидан келиб чиқиб, электронлар учун тузоқ бўлган нуқсонларнинг пайдо бўлиши билан боғлиқлиги аниқланди.

10. Биринчи марта сиртда пайдо бўладиган манфий потенциални технологик хусусият сифатида ишлатиш мумкинлиги кўрсатилди, бу эса ҳосил бўлган юпқа қатлам кристалл тузилишининг мукамаллигига ҳар томонлама таъсир этади. Кристалл юзасини электронлар билан зарядлаб юпқа қатлам ўстириш маълум панжара нуқсонларининг пайдо бўлишига олиб келади, шунингдек, кейинги қатламларининг кристалланиши учун ўзаро мувофиқликни белгилайди.

11. Ночизикли регрессия таҳлили усули билан кенг ҳудудли кристаллар юзасида нуқсонларнинг ҳосил бўлиши ва парчаланишининг математик моделлари ҳисоблаб чиқилган. Олинган математик моделлар бошқа материаллар учун нуқсонларнинг шаклланиши, йиғилиши ва парчаланиши учун керак бўлган ҳарорат диапазонларини прогноз қилиш имконини беради.

12. Кенг зонали LiF, SiO₂, ZnO кристалларининг сирт нуқсонларини тўлиқ ток спектроскопияси ёрдамида ўрганиш шуни кўрсатадики, улар натижавий радиолиз маҳсулотларида фарқланади: агар LiF да нурланиш нуқсонларнинг тўпланишиб катта агрегатлар ҳосил бўлишига олиб келса, SiO₂ да сиртни тозалаш ёки оксидланишга олиб келади ва ZnO ни нурлантириши эса сирт нуқсонлари туфайли қатлам юзаси зарядланишига олиб келади.

13. Ушбу ишда олинган янги тажриба натижалари сирт нуқсонларининг чангланиш, тозалаш, зарядлаш, оксидланиш ва ҳоказоларга таъсири каби бир қатор илмий ва технологик муаммоларни ҳал қилиш имконини беради. Ҳамда сирт нуқсонларини шаклланиш жараёнларини янада чуқурак ўрганишда, улардан назарий моделлар ва механизмларни ишлаб чиқишда фойдаланиш мумкин.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 ПО
ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ
ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

**ИНСТИТУТ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ФИЗИКА-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ**

ШАРОПОВ УТКИРЖОН БАХОДИРОВИЧ

**ПОВЕРХНОСТНЫЕ ДЕФЕКТЫ В ШИРОКОЗОННЫХ
КРИСТАЛЛАХ LiF, SiO₂, ZnO**

01.04.04 – Физическая электроника

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА (DSc) ФИЗИКО-
МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

ТАШКЕНТ – 2023

Тема докторской (DSc) диссертации зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2022.4.DSc/FM25.

Диссертация выполнена в институте Ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А.Арифова и в Физико-техническом институте АНРУз.

Автореферат диссертации на трёх языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.iplt.uz) и Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziynet.uz).

Научный консультант: Эгамбердиев Бахром Эгамбердиевич
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: Комолов Алексей Сергеевич
доктор физико-математических наук, профессор

Максимов Сергей Евлантиевич
доктор физико-математических наук

Ниматов Самад Жайсанович
физика-математика фанлари доктори

Ведущая организация: Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека

Защита диссертации состоится « 8 » февраля 2023г.в 14³⁰ часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 при институте Ионно-плазменных и лазерных технологий по адресу:100125, г. Ташкент, ул. Дурмон йўли 33. Тел./факс:(99871)262-32-54, e-mail:info@iplt.uz.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре института Ионно-плазменных и лазерных технологий (зарегистрирован за № 1), по адресу. 100125, г. Ташкент, ул. Дурмон йўли, 33. Тел:(+99871)262-31-69.

Автореферат диссертации разослан «27» января 2023г.
(протокол реестра № 1 от «27» января 2023г.).



Х.Б. Ашуров
Председатель научного совета по присуждению ученых степеней, д.т.н., профессор

И.Д. Ядгаров
Ученый секретарь научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с

Б.Е. Умирзаков
Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (аннотация докторской (DSc) диссертации)

Актуальность и востребованность темы диссертации. В мировом масштабе к высокотехнологичным материалам предъявляются требования, которые подразумевают наличие особых поверхностных свойств со специальными рабочими характеристиками, в отличие от объемных. Интерес к неупругим процессам образования дефектов в приповерхностной области широкозонных материалов при воздействии на них атомными частицами постоянно растет из-за широкого использования этих материалов в микро и оптоэлектронике, космическом материаловедении и других областях науки и техники. Поэтому важны исследования, направленные на установление природы процессов модификации поверхностных свойств материалов при бомбардировке электронами и ионами.

На сегодняшний день в мире интерес к дефектообразованию связан с решением задач нанопитакии, получением информации о механизме взаимодействия облучения с поверхностью кристаллов и тонких пленок. Широкозонные кристаллы и поверхностные дефекты, возникающие при облучении электронами и ионами малой энергии, актуальны для физики поверхности. Важнейшей задачей является изучение свойств тонких пленок во время их роста, адсорбции, коалесценции, так как образование дефектов, их миграция по поверхности во время облучения и отжига существенно влияют на свойства получаемой поверхности. Также связь между поверхностными дефектами и процессами кластерного распыления поверхности кристаллов мало изучена и требует экспериментального и теоретического исследования. С каждым днем растет объем и скорость передачи информации, который определяется необходимостью создания на основе широкозонных кристаллов – приборов и устройств микро и оптоэлектроники: волноводов, разветвителей, датчиков повседневного использования, модуляторов и фотоприемников. Наиболее слабым местом микроэлектроники до недавнего времени явилось отсутствие информации и пренебрежение дефектами на поверхности при ионной имплантации, диффузии и других технологических процессах. Последнее говорит об использовании инженерии дефектов на создание условий для получения поверхности с заданными свойствами.

В нашей республике ведутся научно-исследовательские работы по данной тематике, в частности, исследование дефектов структуры диэлектриков по всему объему, где материал необратимо аморфизуется, а кристаллическая структура существенно изменяется. Монографии, статьи, опубликованные на ряде международных конференций с участием ведущих зарубежных ученых, а также ежегодные мероприятия в стране свидетельствуют о достижениях в этой области и международном признании результатов, достигнутых узбекскими учеными. При разработке новых приборов и устройств микроэлектроники на основе широкозонных кристаллов сталкиваются с принципиальной проблемой: созданные в приповерхностной области дефекты либо стимулируют процессы получения p-n переходов, либо подавляют. В этой связи значительный интерес представляют определенные типы поверхностных

дефектов, которые были использованы при инженерии дефектов – радиационно-стимулированной диффузии, планарно-эпитаксиальном методе и имплантации, для получения p-n переходов. Таким образом, исследование поверхностных дефектов в широкозонных кристаллах является приоритетным направлением и актуальной задачей в области современного материаловедения, занимающийся поиском и созданием материалов для элементной базы устройств микроэлектроники нового поколения, принцип работы которого основан с манипуляцией дефектов для изменения поверхностных и объемных свойств материала под действием электронного и ионного облучения.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит решению задач, предусмотренных Указом Президента № УП-4947 «О стратегии действий по дальнейшему совершенствованию управления, ускоренному развитию Республики Узбекистан» от 7 февраля 2017¹ года и в Постановлениях Президента № ПП-2772 «О мерах по дальнейшему совершенствованию управления, ускоренному развитию и диверсификации электротехнической промышленности на 2017-2021 гг.» от 13 февраля 2017 года и № ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно – правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики Узбекистан: ПФИ-2 – «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение», П– «Энергетика, энерго- и ресурсосбережение».

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации². Научные исследования в области дефектообразования и поверхностного анализа разных веществ, а также исследования физико-химических процессов, протекающих на поверхности твердого тела, проводятся в ведущих центрах, в высших образовательных учреждениях в том числе: в Санкт-Петербургском государственном университете, лаборатории электроники поверхности твердого тела (Россия), Шанхайском университете, школа материаловедения и инженерии (Китай), в научных лабораториях Института физики твердого тела РАН и Физико-техническом институт им. А.Ф. Иоффе, в лаборатории диффузии и создания дефектов в полупроводниках (Россия), Копенгагенском университете, отдел физики (Дания), и в институте ядерных исследований АН РУз. По направлению исследований дефектообразования на поверхности, в том числе в широкозонных кристаллах на мировом уровне были решены ряд актуальных проблем и получены следующие важнейшие научные результаты:

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

² Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации разработан на основе: www.sciencedirect.com, www.springerlink.com, www.elsevier.com, www.scopus.com, www.nature.com, www.oxfordjournals.org, www.sciencemag.org, www.northcarolina.edu, www.umb.edu, www.osu.edu, www.stonybrook.edu, www.bw.edu, www.msu.ru, и других источников

На основе радиационно стойких кристаллов ZnO был создан фотодиоды Шоттки для дозиметрии ультрафиолетовых (УФ) –излучений. В частности, исследования лазерной генерации в широкозонных гетеропереходах проводились многими учеными мира, американскими (Schrier, A.P. Alivisatos), российскими (Ж.И. Алферов, С.В. Иванов), китайскими (P. Chen, Y. Wang), узбекскими (Э.М. Ибрагимова, С. Курбанов) и другими специалистами.

В настоящее время в мире ведётся огромное количество исследований по разработке приборов и развитию методик для образования, обнаружения и анализа дефектов на поверхности широкозонных кристаллов. Также исследования физико-химических параметров поверхности широкозонных кристаллов актуальны по следующим направлениям: процессы очистки и адсорбции атомов на поверхности твердого тела; разработка и создание определенных типов поверхностных дефектов, которые будут использованы при инженерии дефектов – радиационно-стимулированной диффузии, планарно-эпитаксиальном методе и имплантации, для получения р-п переходов; выявление физико-химических свойств поверхности при дефектообразовании.

Однако не были проведены следующие детальные исследования: состояния поверхности и электронной структуры, влияние различных видов облучения на образование дефектов на поверхности, связь зарядки со стехиометрией поверхности, концентрация кислорода, роль дефектов на поверхности в физико-химических процессах окисления и очистки образцов, возможность создания р-п переходов с использованием радиационно-стимулированной диффузии дефектов.

Во всем мире в перспективных направлениях, в частности, в планарной технологии, в микроэлектронике, в оптоэлектронике, в современном материаловедении, в нанотехнологии низкоразмерных систем проводятся научно – исследовательские работы по изучению дефектообразования в широкозонных кристаллах.

Степень изученности проблемы. Большая часть исследований, связанных с дефектообразованием, выполнена К. Шварцом, Лущиком Ч.Б. и Лущиком А.Ч. при облучении электронами и ионами высоких (МэВ) энергий. Поэтому экспериментальное исследование дефектообразования на поверхности твердых тел при облучении низкоэнергетичными (субкэВными) электронами и ионами актуально для выяснения механизмов образования точечных и агрегатных дефектов с последующей их коагуляцией в агрегатные центры. Анализ работ показывает, что практически подавляющее большинство работ посвящено исследованиям дефектообразования на основе объёмных кристаллов (Закис Ю.Р.), в то время как несколько работ, посвящены комплексному изучению условий формирования точечных дефектов на основе облучаемых пленок ионных кристаллов (Golek F., Sobolewski W.J.). В настоящее время Т.Т. Басиевым, Л.Н. Демьянцевым определено, что для успешного применения пленочных лазеров требуется увеличить концентрацию и стабильность агрегатных дефектов в 2 – 3 раза. Столь значительное повышение эффективности требует новых исследований

механизма формирования точечных дефектов и их агрегатов, приповерхностных областей, в которых протекают важнейшие процессы возбуждения решетки широкозонных кристаллов медленными электронами и ионами.

Мало изученными являются процессы дефектообразования на поверхности полупроводниковых образцов оксида цинка и кремния. Это связано с трудностями получения точечных дефектов на поверхности монокристаллических полупроводниковых подложек. Необходимо также разработать поверхностно чувствительные методы регистрации точечных дефектов в монокристаллических полупроводниковых подложках. Процессы дефектообразования на поверхности широкозонных кристаллов при облучении низкоэнергетическими электронами и ионами находятся на стадии предварительного изучения. Поэтому комплексное изучение условий формирования точечных дефектов и их агрегатов на основе широкозонных кристаллов является актуальной научной и практической задачей.

При этом многие аспекты механизмов образования дефектов на поверхности остаются неясными до сегодняшнего дня. Не ясной остаётся потенциальное распыление диэлектриках, исследованный независимо друг от друга Ш.С. Раджабовым и Ф. Авмауром, что «стимулирует распыление «Кулоновский взрыв» или «Распыление стимулированной дефектами»? В тоже время дефектообразование в твердых телах активно исследуется учеными из Узбекистана Э.М. Ибрагимовой и И. Нуритдиновым, также в нашем институте под руководством Б.Г. Атабаева.

Имеется ряд научных и технологических проблем, таких как влияние поверхностных дефектов на распыление, очистку, зарядку, окисление, и т.д., которые могут способствовать изменению представлений о процессах поверхностного дефектообразования, теоретических моделей и механизмов.

Эти, а также ряд не решенных на сегодняшний день задач, касающихся образования дефектов на поверхности широкозонных кристаллов при электронном и ионном облучении, послужили стимулом для проведения исследований, результаты которых составили основу данной диссертационной работы.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного или научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертационная работа. Настоящая диссертационная работа выполнена в институте Ионно плазменных и лазерных технологий им. У.А.Арифова Академии Наук Республики Узбекистан в рамках фундаментальных научных проектов молодых ученых ФЁ2-ФА-Ф102 «Исследование поверхностных дефектов и масс продуктов многокомпонентных кристаллов методами электронной спектроскопии и ионной масс-спектрометрии» (2012-2013), ЁФ2-ФА-1-12507 «Изучение дефектообразования и распыления кристаллов оксида цинка при облучении электронами и ионами» (2016-2017), а также Ташкентском государственном техническом университете им. Ислама Каримова в рамках научных прикладных исследований ОТ-Атех-2018-474 «Разработка

технологии низкотемпературной ионной очистки и электронно-спектрометрического контроля кремниевых пластин» (2018-2020).

Цель исследования. Целью данной работы является определение закономерностей образования поверхностных дефектов в широкозонных кристаллах при электронном и ионном облучении, а также установление взаимосвязи дефектов с поверхностными состояниями и с другими физическими процессами, происходящими на поверхности.

Задачи исследования:

модернизация экспериментальной сверхвысоковакуумной установки спектроскопии полного тока (ПТ);

разработка методики по исследованию образования поверхностных дефектов в кристаллах ZnO, SiO_x и LiF методом спектроскопии ПТ при бомбардировке электронами и ионами;

исследование образования поверхностных дефектов в системе LiF/Si(111) при бомбардировке электронами;

исследование образования поверхностных дефектов в системе LiF/Si(111) и их влияние на распыление при бомбардировке ионами;

исследование образования дефектов и их кластеров на поверхности кристаллов SiO_x при бомбардировке электронами и ионами;

изучение влияния образования дефектов на поверхности кристаллов SiO_x на процессы очистки и окисления при бомбардировке электронами и ионами;

экспериментальные исследования и определение порогов образования поверхностных дефектов в ZnO при бомбардировке электронами;

изучение влияния образованного отрицательного заряда при бомбардировке электронами и образованных дефектов на поверхностные состояния в ZnO.

Объектом исследования являются образцы широкозонных кристаллов фторида лития, оксидов кремния и цинка.

Предметом исследования являются стимулирование поверхностных состояний электронной и ионной бомбардировкой, позволяющей получить дефектную и модифицированную поверхность исследуемых образцов, а также закономерности образования дефектов, и физические механизмы, аналитические связи и математические модели, отображающие процесс воздействия на поверхностные состояния, параметры устройства, режимы работы и показатели, и законы их изменения.

Методы исследования. В диссертации использовались следующие высокочувствительные методы исследования: Метод электронной спектроскопии ПТ позволяет получить количественную информацию о радиационных дефектах. Для уточнения роли дефектов и состояния поверхности в процессах распыления были проведены сравнительные исследования методом вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС), а также моделирование процессов ионной бомбардировки кристаллов проводили с использованием программного пакета SRIM. Также использовались методы математического статистического анализа, DFT, определения степени погрешности, планирования экспериментов, а также

методы, указанные в действующих нормативных документах.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

проведена модернизация сверхвысоковакуумной установки спектроскопии ПТ и разработана методика исследования кристаллов ZnO, SiO_x/Si(111) и LiF, позволяющая проводить комплексные исследования дефектообразования, изменения работы выхода и зонной структуры поверхности при одинаковых условиях;

впервые разработан способ определения точечных дефектов в распыленном кластере ионных кристаллов. Анализ полученных данных показывает, что значительное количество вторичных ионов в своем составе содержат атомы, распыленных с дефектов структуры поверхности. Показано, что распыление происходит за счет модели «Defect Mediated Sputtering»;

впервые в системе LiF/Si(111) при электронном и ионном облучении показано образование микроскопических агрегатов галогена на поверхности;

впервые методом SRIM и спектроскопии ПТ исследовано влияние массы первичных ионов на образование межузельных, внедренных дефектов и поверхностных вакансий в кристалле LiF и Si. Результаты исследования позволили лучше понять механизмы дефектообразования на поверхности;

на основе спектров ПТ окисленных и чистых поверхностей кремниевых кристаллов установлена взаимосвязь поверхностных дефектов с другими процессами, происходящими на поверхности, такими как адсорбция, десорбция и окисление;

впервые проведены сравнительные исследования состояний поверхности при облучении кремния отрицательными и положительными ионами. При облучении положительными ионами наблюдалась очистка от окислов, при облучении отрицательными ионами наблюдалось интенсивное окисление поверхности образца;

по данным спектров ПТ (при энергии возбуждения 0,5÷1,0 эВ) на поверхности кремния найдено существование поверхностного дефекта, который в литературе называют кислородно дефицитным центром;

впервые исследовано влияние энергии электронов ($E=0\div600$ эВ) на поверхности кристаллов оксида цинка. Наблюдаемые в эксперименте кинетические характеристики зарядки кристалла ZnO связаны с модификацией его поверхности и генерацией радиационно-стимулированных дефектов, являющихся ловушками для электронов;

показано, что на поверхности оксида цинка при электронной бомбардировке работает двухслойная модель зарядки;

получены математические модели образования и распада дефектов на поверхности широкозонных кристаллов.

Практические результаты исследования состоят в следующем:

Методика определения дефектов во вторичном кластере по масс-спектрам, которые безусловно имеют важную роль в области физической электроники, позволяет обнаружить дефекты при распылении кристаллов.

Предложенный метод ионного травления и с последующим отжигом при

температуре 650°C позволяет получить атомарно чистую поверхность кремния.

Определённая кинетика окисления поверхности кремния за счет кислородно дефицитных центров даёт возможность эффективно проследить за толщиной МДП структуры в процессах подготовки образцов, которые несомненно имеют важную роль в области микроэлектроники.

Разработаны основы, воспроизводимой технологии получения эпитаксиальных пленок при использовании зарядки поверхности подложки, которая приводит к образованию сплошной двумерной решетки.

Достоверность результатов исследований обеспечивается использованием комплекса современных спектроскопических методов ПТ и ВИМС; на которые получены авторские свидетельства, и согласованностью экспериментальных результатов, полученных разными методами, между собой, а также с результатами теоретических расчетов; анализом ошибок измерений; непротиворечивостью полученных результатов общефизическим представлениям и имеющимся литературным данным.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов настоящей диссертации, полученных при совместном использовании нескольких методик, состоит в том, что они расширяют представления о взаимодействии электронов и ионов с поверхностью твердого тела, включая общую схему картины создания дефектов на поверхности. Предложенные механизмы образования дефектов расширяют понимание физико-химических процессов, протекающих на поверхности широкозонных кристаллов, а также дают важную информацию и открывают новые возможности при исследованиях поверхности твердых тел.

Полученные данные по образованию дефектов и их агрегатов в широкозонных кристаллах важны для определения радиационной стойкости материалов, стимуляции процессов конденсации эпитаксиальных пленок, анализа электронной структуры поверхности исследуемого материала электронным и ионным пучком. Закономерности, полученные для широкозонных кристаллов, могут быть использованы для интерпретации явлений, наблюдаемых в других типах веществ.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что проведена модернизация сверхвысоковакуумной установки спектроскопии ПТ, энергия облучения электронов увеличена до $E=1\text{кэВ}$. Разработанная методика определения дефектов во вторичном кластере по масс-спектрам поможет при решении проблем обнаружения и анализа дефектов исследуемой поверхности, а также предложенные новые данные и методы могут быть применены для исследования и анализа других широкозонных кристаллов, в том числе, диэлектрических и полупроводниковых кристаллов. Новый подход стимулирования окисления и очистки может быть применён при разработке технологии дефектной инженерии - перед диффузией или ионной имплантацией, которые практически важны при разработке тонкопленочных структур типа металл-диэлектрик-полупроводник и полупроводник-диэлектрик-полупроводник,

применяемых в приборах электронной промышленности. Предложенный способ реконструкции поверхности с возможностью изменения параметров получаемой поверхности на начальном этапе роста кристалла позволяет разработать воспроизводимую технологию получения эпитаксиальных пленок.

Полученные результаты могут служить в качестве научной базы для развития спектроскопии ПТ различных диэлектрических и полупроводниковых объектов, в том числе широкозонные кристаллов, которые имеют практическое применение в качестве детекторов в термолюминесцентных и термоэмиссионных дозиметрах, люминесцентных индикаторов излучения, сред для записи и хранения информации, нано и опто и микроэлектронике, в лазерной технологии, при создании p-n переходов и в других качествах.

Внедрение результатов исследования. На основе полученных результатов исследования физических процессов на поверхности широкозонных кристаллов:

экспериментальные результаты, полученные при изучении процессов поверхностного окисления кремния при температурах 400°C - 1000°C были использованы в при выполнении научных проектов №АЕ4-ФА-0-19520: “Исследование очистки технического кремния путем перекристаллизации” выполненных в 2012-2013г., и №ЁФ3-ФА-0-25046 “Взаимное влияние примесей на их коэффициент сегрегации и предельную растворимость при перекристаллизации”, выполненных в 2014-2015г. (Справка Академии наук Республики Узбекистан от 4 октября 2019 года №2/1255-2649). Использование научных результатов позволило с высокой точностью измерять растворимость и сегрегацию на поверхности кремния;

экспериментальные результаты, полученные в ходе проведения исследований, связанные с имплантацией ионов в кристалл кремния, а также накоплением заряда на поверхности кристаллов оксида цинка были использованы в процессе разработки силовых диодов и светодиодов (справка Ассоциации “УЗЭЛТЕХСАНОАТ” №04-4/1054 от 1 августа 2019г.). Использование научных результатов позволило повысить эффективность продукции при разработке силовых диодов и светодиодов;

экспериментальные и теоретические результаты, полученные в ходе проведения исследований эффекта гибридизации и окисления поверхности кремния, были использованы при дальнейших исследованиях других образцов, состоящих из металлических наночастиц в зарубежных журналах с высоким импакт-фактором (Materials 2022, V. 15, Scopus, IF – 3.78; Energy Technology 2022, V.10, Scopus, IF – 4.149; Physica B Condensed Matter 2022, V.639, Scopus, IF – 2,988). Использование научных результатов позволило развить методы синтеза и прогнозирования двумерных полупроводников, которые представляют альтернативу термоэлектрическим, фотоэлектрическим солнечным элементам, оптоэлектронным устройств следующего поколения благодаря их исключительным свойствам на основе металлических и оксидных 2D-материалов;

Апробация результатов исследования. Результаты исследований были обсуждены на 9 международных и республиканских конференциях.

Опубликованность результатов исследования. Полученные результаты по теме диссертации изложены в 24 научных трудах, из них 14 научных статей, в том числе 6 зарубежных и 8 в научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованной литературы из 236 наименований. Работа изложена на 207 страницах, содержит 53 рисунков, 7 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, сформулированы цель и задачи, выявлены объект и предмет исследования, определено соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан, изложена научная новизна исследования, раскрыты теоретическая и практическая значимость полученных результатов, приведены сведения о внедрении результатов, представлены сведения по опубликованным работам и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **«Обзор экспериментальных и теоретических работ по дефектообразованию в широкозонных кристаллах»** представлены основные сведения по радиационным эффектам на границе раздела поверхность-твердое тело, а также рассматриваются: поверхностные дефекты в ионных кристаллах при воздействии электронами и ионами; поверхностные дефекты в широкозонных оксидных материалах; поверхностные дефекты в широкозонном кристалле оксида цинка. На основе проведённого литературного обзора было получено заключение о том, что широкозонные кристаллы обладают уникальными физическими свойствами имеют важное научное и практическое значение. Это обосновывает, что исследования поверхностных дефектов в широкозонном кристалле представляют собой актуальную проблему.

Во второй главе **«Методика измерений и экспериментальная установка»** приводится описание приборов, методов спектроскопии ПТ, SRIM и техники экспериментальных исследований, используемых образцов.

В экспериментах использовались сверхчистые монокристаллы ZnO и поликристаллы оксида цинка, выращенные методом взрывного лазерного напыления на подложках (Al_2O_3) сапфира, также кристаллы фторида лития и оксида кремния. Выбор этих кристаллов связан с тем, что все они имеют широкую ширину запрещенной зоны, характеризуются ионной, ионно-ковалентной связями, что позволяет проводить исследования дефектообразования на поверхности в условиях нашего эксперимента. Исследуемые образцы представляли собой плоские пластинки с толщиной ~ 1мм, с поперечными размерами ~1×1 см, кристаллографической плоскостью (111).

Экспериментальная сверхвысоковакуумная установка спектроскопии ПТ использовалось для исследования дефектообразования и распыления широкозонных кристаллов под действием электронов и ионов.

Разработанная и модернизированная экспериментальная установка спектроскопии ПТ, позволяет проводить исследования регистрации дефектов на поверхности образцов при облучении электронами с энергией 0-1000 эВ, с током 1 нА.

Для уточнения роли дефектов в процессах распыления были проведены некоторые эксперименты методом молекулярной динамики- программное обеспечение SRIM.

Третья глава «Образование дефектов и кластеров на поверхности кристаллов LiF при облучении электронами и ионами» посвящена экспериментальных и теоретических результатов исследований образования дефектов и кластеров на поверхности кристаллов LiF при облучении электронами и ионами с использованием различных методик.

Приводятся полученные дозовые и энергетические зависимости спектров ПТ подложки LiF в процессе облучения электронами с энергией 100-800эВ, до дозы 10^{14} эл/см². Облучение электронами с энергией 100эВ и дозой 10^{14} эл/см² приводит к появлению на фоне спектра широких максимумов коллоидных и фторсодержащих агрегатов. Также при сравнении энергетических зависимостей электронного облучения LiF найдено сходство проявляемых процессов с работами, выполненными на спектрофотометре СФ-46.

Энергетические зависимости высоты пиков спектра ПТ LiF (рис. 1), показали, что при энергии электронов 600эВ начинается интенсивное образование кластерных и агрегатных дефектов.

Как видно, с увеличением энергии электронов интенсивность пика больших по размеру коллоидов (более 100 атомов лития- 2,7эВ), начинает снижаться, но не исчезает; образуются кластеры лития с маленькими размерами (2,0 и 1,2 эВ) и интенсивность их пиков увеличивается. То же происходит и для V-центров (рис. 1). Таким образом, при облучении электронами с энергией 600эВ, на поверхности кристалла начинается распыление. На поверхности образуются островки коллоидов и агрегатов фтора разного размера.

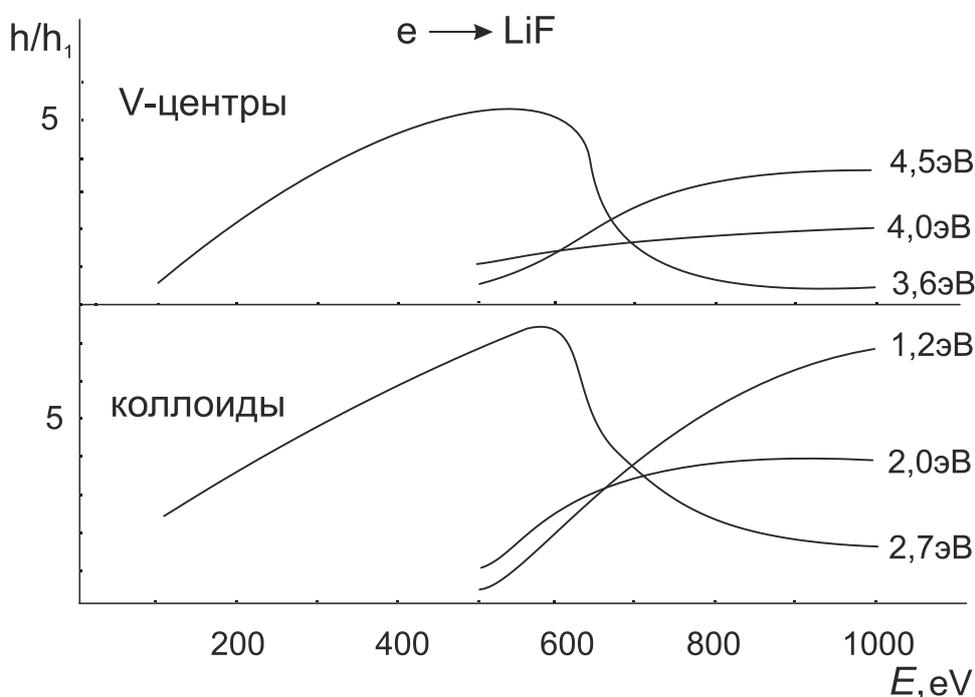


Рис. 1. Энергетические зависимости высоты пиков спектра ПТ LiF, при разных энергиях (100-1000эВ)

Также приводятся результаты формирования дефектов и кластеров на

поверхности LiF в процессе облучения ионами. Приведены дозовые зависимости спектров ПТ кристалла LiF при облучении ионами Cs⁺ и Cl⁻ с энергией 1,0 кэВ. Показана разница полученных спектров: при облучении ионами Cl⁻ не происходит зарядка поверхности, и интенсивность пика H_{Cl} по сравнению с пиком H_{Cs} почти в три раза больше. Повторные исследования показали, что, действительно, в случае облучения хлором, интенсивность пика H_{Cl} по сравнению с пиком H_{Cs} почти в три раза больше относительно фона спектра.

Также приведены данные по эмиссии положительных вторичных ионов из кристалла LiF при бомбардировке положительными ионами Ar⁺, и отрицательных вторичных ионов из кристалла LiF при бомбардировке положительными ионами Cs⁺.

Из данных исследования кристалла LiF при облучении ионами Cs⁺ и Cl⁻, сделан вывод, если при бомбардировке образуются анионные комплексы, в решетке имеются междоузельные атомы фтора, которые регистрируются при распылении в виде положительных и отрицательных ионов фтора F₂, F₃, F₄. Если образуются коллоидные центры, то при распылении должны регистрироваться положительные или отрицательные ионы типа Li₂, Li₃, Li₄. (рис. 2.а).

Определено, что каждые четыре сорта отрицательно заряженных кластеров из пяти содержат прикрепленные к ним дефекты поверхности, созданные бомбардировкой ионного кристалла.

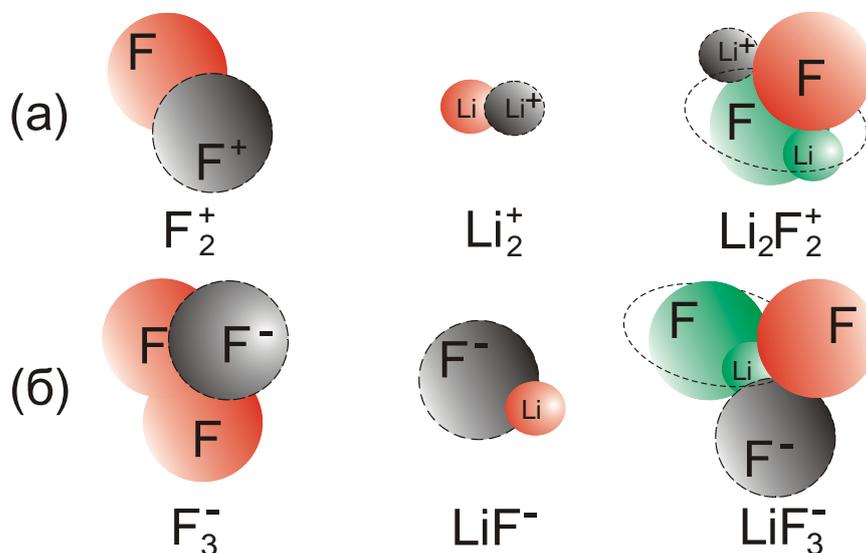


Рис. 2. Возможные варианты структуры и ориентации дефектов во вторичных кластерах, возникающих в процессе ионной бомбардировки кристалла LiF (а – положительные, б – отрицательные кластеры).

Во всех остальных случаях вторичные отрицательные кластеры образуются междоузельными, коллоидными и кластерными V-центрами. Таким образом, весьма вероятно, что основная часть заряженных продуктов распыления ионных кристаллов LiF состоит из атомов в составе поверхностных дефектов.

Излагаются результаты влияния массы бомбардирующего иона на образование вакансий, внедренных и междоузельных дефектов на поверхности LiF. Для проверки и сравнения данных спектров ПТ, проведены исследования в программе SRIM. Были проведены исследования образования вакансий, внедренных и междоузельных дефектов на поверхности LiF в зависимости от массы бомбардирующего иона.

Показано, с уменьшением массы первичного иона распределение дефектов внедрения на поверхности увеличивается, но и смещается в сторону объема кристалла примерно на 100\AA . Внедренных ионов цезия на поверхности вообще не наблюдается.

Исследования показали, что с увеличением массы (соответственно размеров иона) первичного иона образуется большое количество вакансий и междоузельных дефектов на поверхности, чем в объеме кристалла. Для ионов с наименьшей массой ионов распределение дефектов внедрения больше на поверхности, чем в объеме кристалла.

Также из спектров ПТ, при высоких дозах и энергиях облучения на поверхности кристалла лития фтора наряду с коллоидными центрами, образуются также скопление нейтральных атомов фтора. Выявленные пики при энергиях 3,6 эВ являются скопление нейтральных атомов фтора (макроскопический агрегат галогенов) на поверхности, ещё их называют V-центры ами.

На рисунке 3 показаны дозовая и температурная зависимости относительной интенсивности пика V-центров при энергии 3,6эВ.

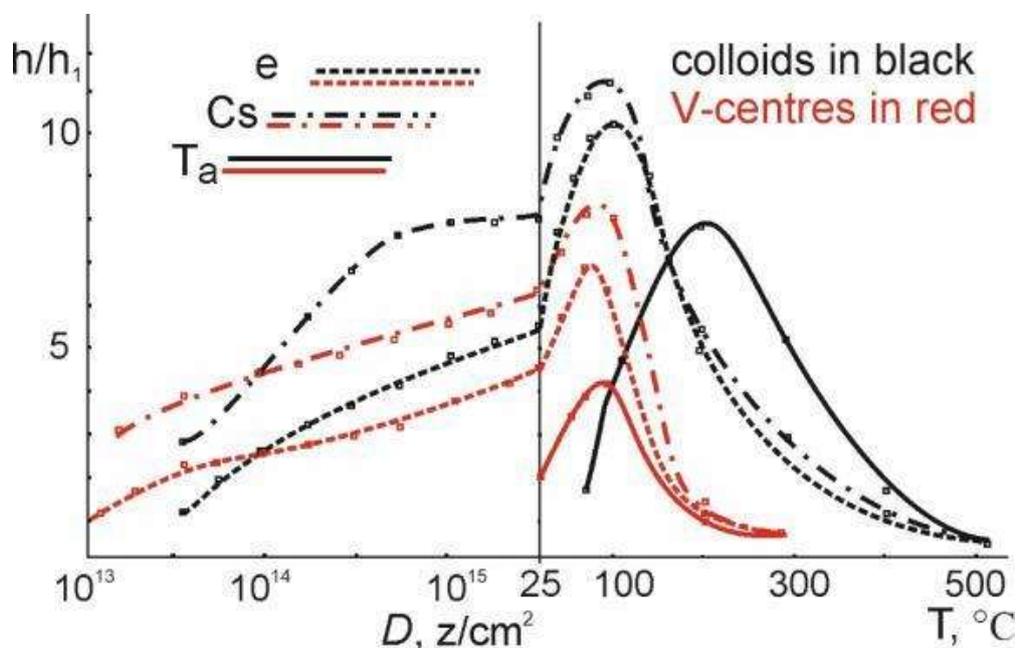


Рис. 3. Дозовая и температурная зависимость относительной интенсивности пика V-центров при энергии 3,6эВ

Как видно из рисунка, относительно большую концентрацию V-центров можно создать при облучении ионами цезия, наименьшую – электронами. Дозовые зависимости показывают, что во всех случаях на поверхности

кристалла при дозах 10^{14} заряд/см² наблюдаются V-центры, с увеличением дозы происходит скопление нейтральных атомов фтора, что приводит к увеличению их концентрации. Как известно из литературы, конечный продукт H-центра – это нейтральный фтор и вакансия на поверхности. Они стабильны и мобильны. Температурная обработка V-центров при 100°C приводит к увеличению концентрации на поверхности, что указывает на диффузию таких центров из объема на поверхность, а также на усиление мобильности V-центров. Далее температурный отжиг V-центров выше 200°C приводит к уменьшению их концентрации на поверхности, что указывает на десорбцию из поверхности, и выше 400-500°C приводит к полной десорбции фтора из поверхности.

Таким образом, выявленные пики при энергиях 3,6эВ идентифицированы как скопление нейтральных атомов фтора (макроскопический агрегат галогенов) на поверхности.

В четвертой главе «**Образование дефектов и кластеров на поверхности кристаллов Si(111) и SiO_x при распылении электронами и ионами**» рассмотрены экспериментальные и теоретические результаты исследований образования дефектов и кластеров на поверхности кристаллов Si(111) и SiO_x при облучении электронами и ионами с использованием различных методик.

Приводятся результаты спектров ПТ поверхности кристаллов Si(111) и SiO_x при облучении электронами и ионами. Исследованы роль и влияние поверхностных состояний, вакансий, междоузельных и примесных дефектов на очистку и окисление поверхности кремния. Получены спектры ПТ и значения работы выхода образца Si(111) в процессе адсорбции газов при комнатной температуре. Определено, что спектр претерпевает существенное изменение в процессе адсорбции газов.

На рис.4 приведены спектры ПТ кремния при облучении отрицательными ионами цезия и хлора с энергией 2,5 кэВ. Кривая 1 соответствует спектру ПТ чистого кремния со структурой 7x7. Кривая 2 соответствует спектру ПТ поверхности кремния после облучения положительными ионами цезия с энергией 2,5 кэВ, дозой 10^{13} ион/см².

Как видно из спектра, первичный пик смещается в сторону низких энергий, который указывает на снижение работы выхода поверхности, также при этом снижается интенсивность дифракционной компоненты спектра (правая часть спектра 30-40эВ). С увеличением дозы на 10^{14} ион/см² (кривая 3), появляются пики в низкоэнергетической стороне спектра при энергии 1,0 (H_{cs}) и 5,0 эВ. Также исчезают пики при энергии 7,0 и 10,0 эВ, показывающие межзонные состояния кремния. С увеличением дозы на 10^{15} ион/см² (кривая 4), увеличивается интенсивность пика (H_{cs}) 1,0 эВ, исчезают максимумы и минимумы, характерные для спектра ПТ кремния, что указывает на деградацию поверхности.

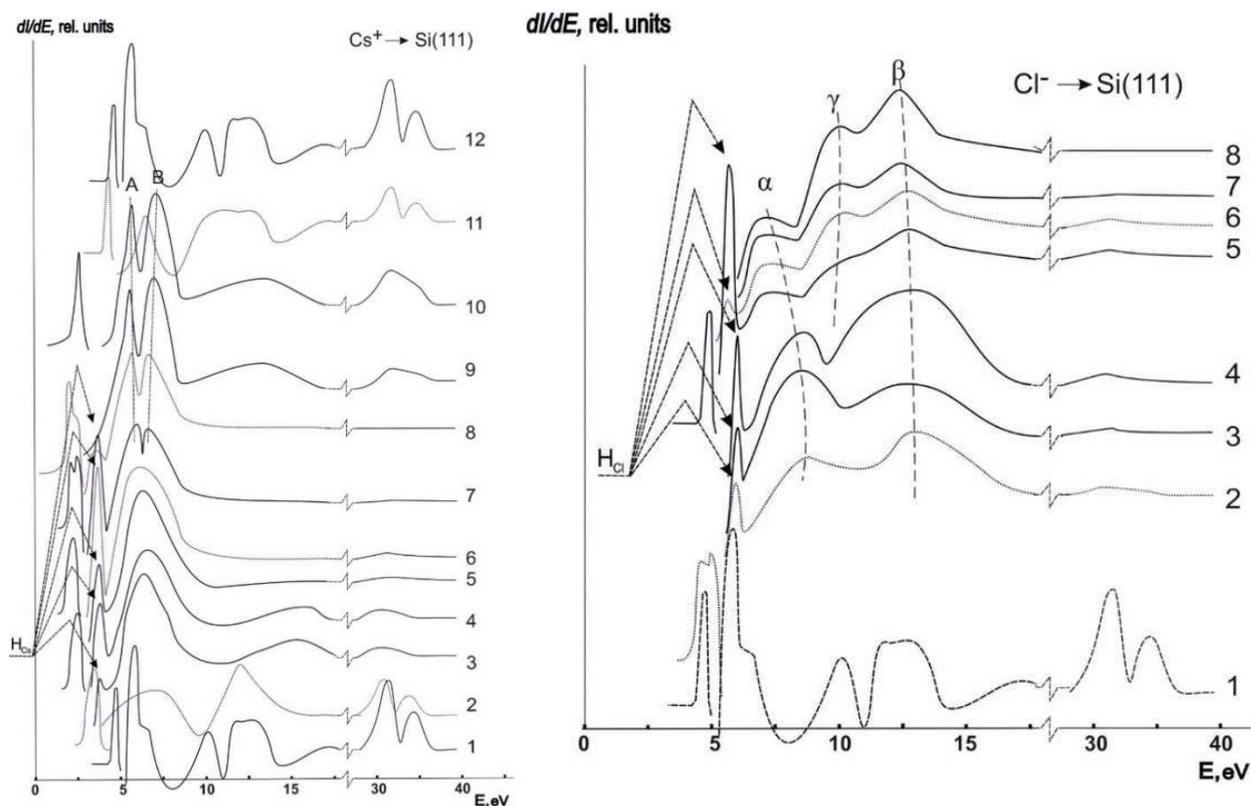


Рис. 4. Спектр ПТ кремния в процессе ионной бомбардировки (Cs и Cl) и после отжига

Пик при энергии 1,0 эВ может соответствовать внедренным междуузельным дефектам цезия на поверхности, так как энергетический уровень пика лежит внутри запрещенной зоны кремния. Отжиг при температуре 100, 200°C (кривые 5 и 6) приводит к диффузии образованных дефектов из объема на поверхность. При температуре 200°C наблюдается самая минимальная работа выхода поверхности, что указывает на образование сплошной пленки цезия на поверхности кремния.

На рис.4 также приведены спектры ПТ кремния при облучении отрицательными ионами хлора с энергией 2,5 кэВ. Кривая 2 соответствует спектру ПТ поверхности кремния после облучения отрицательными ионами хлора с энергией 2,5 кэВ, дозой 10^{13} ион/см². Также образуются широкие максимумы α и β . Интенсивный пик при энергии 0,8 эВ также соответствует внедренным дефектам хлора на поверхности кремния (H_{Cl}). Дальнейшее увеличение дозы 10^{14} ион/см², кривая 3 приводит к увеличению интенсивности пика 0,8 эВ, а также разрешаются пики α и β в спектре ПТ. При дозах облучения 10^{15} ион/см² также увеличивается интенсивность пика H_{Cl} , α и β (кривая 4).

При отжиге 100°C происходит диффузия внедренных атомов хлора на поверхность образца, также наблюдается снижение интенсивности пиков α и β , и их сдвиг в сторону низких энергий, что показывает изгиб поверхностных состояний. Также формируется пик при энергии 11,0 эВ – γ . Увеличение отжига на 100-400C, приводит к увеличению интенсивности пиков α , β и γ . Полностью отжигаются внедренные дефекты, пик при энергии 0,8 эВ (кривая

5,6,7,8). Как видно, при облучении отрицательными ионами хлора, наблюдается окисление поверхности кремния, а в случае ионами цезия - очистка поверхности кремния.

В этой главе также приводятся результаты изучения образования дефектов и кластеров на поверхности кристаллов Si(111) при распылении ионами. Подробно анализируются спектры ПТ кремния в зависимости от энергии первичных ионов цезия. Показано, что, с увеличением энергии первичных ионов на поверхности увеличивается количество вакансий и дефектов внедрения, которое приводит к снижению контраста спектра поверхности, после прогрева начинается диффузия дефектов из объёма на поверхность образца, что приводит к сглаживанию поверхности и снижению работы выхода.

Для проверки и сравнения данных проведены дополнительные исследования методом молекулярной динамики в программе SRIM. Были проведены исследования образования вакансий, внедренных и междоузельных дефектов на поверхности кремния в зависимости от массы бомбардирующего иона. Приведены зависимости образования вакансий на поверхности Si от массы бомбардирующего иона для случаев Cs, Rb и Na. Высказано предположение, что усиление выхода кластерных ионов с увеличением массы и энергии первичных ионов обусловлено тем, что при этом значительно увеличивается количество вакансий и дефектов внедрения, и все большее количество атомов кристалла проталкиваются в положения дефекта внедрения и вакансий вблизи других атомов, что способствует процессу образования кластеров и травления поверхности.

После приводятся результаты температурных зависимостей отжига дефектов и кластеров на поверхности кристаллов SiO_x . Подробно анализируется и сравнивается исследование ВИ с поверхности кремния и спектры ПТ необработанных и отожженных образцов.

При сравнении спектров ПТ и масс- спектров ВИ окисленных и чистых поверхностей кремниевых кристаллов, обнаружено, что при высоких температурах отжига кремния выше 600°C междоузельный углерод выходит из объёма на поверхность, но ниже этой температуры углерод на поверхности наблюдается с малой концентрацией, то есть поверхность кремния можно очистить от углерода при температурах ниже 600°C . Далее отжиг до температуры 1000°C не приводит к очистке поверхности от углерода, кислорода и её соединений.

В спектре ПТ чистого кремния со структурой 7×7 наблюдается интенсивный пик при энергии поглощения с разбросом $0,5\div 1,0$ эВ. Также её интенсивность обратно зависит от окисления и температуры, что придаёт ему поверхностные свойства. Таким образом на межфазной границе поверхности кремния найдено существование кислородно-дефицитного центра - НВОНС. При адсорбции кислорода на поверхность кремния её интенсивность снижается значительно.

Исследование пика $0,5\text{эВ}$ в спектре ПТ кремния, позволило получить нам следующие температурные и кинетические зависимости (рис. 5). После

облучения поверхности кремния ионами цезия, подложка отжигалась при температуре 700°C , для получения чистого кремния со структурой Si(111) 7×7 . После получения спектра ПТ производилась стабилизация или, можно сказать, пассивация при разных температурах в течении часа. Далее снова записывали спектр ПТ и следили за интенсивностью пика $0,5\text{эВ}$. Далее без дополнительного воздействия следили за спектром чистого кремния. Мы получили следующие данные:

Пассивация поверхности производилась при температуре 700°C . После в течении 15 минут спектр поверхности чистого кремния не менялся. Далее пассивация поверхности производилась при температуре 600°C . После спектр поверхности чистого кремния не менялся в течение 25 минут. Далее пассивация поверхности производилась при температуре 500°C . При этом поверхность кремния оставалось чистой в течение часа. Далее пассивация при температурах ниже 500°C на поверхности чистого кремния происходила адсорбция остаточного газа в течении 10 минут.

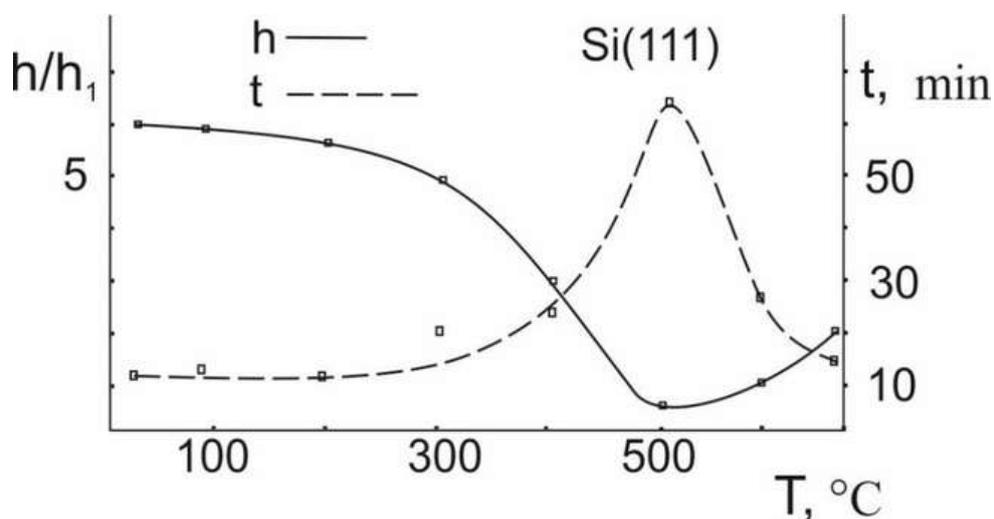


Рис. 5. Кинетическая и температурная зависимость относительной интенсивности пика $0,5\text{эВ}$ на поверхности кристалла кремния

Таким образом, обнаруженный пик $0,5\text{эВ}$ в спектре ПТ действительно принадлежит локальным состояниям на поверхности кристалла кремния. По-видимому, их концентрация на поверхности кремния влияет на скорость адсорбции газов. Дефекты на поверхности кремния создают условия для химической реакции с атомами остаточного газа в вакууме.

В главе 5 «**Образование дефектов и кластеров на поверхности кристаллов ZnO при облучении электронами**» представлены экспериментальные и теоретические результаты исследований образования дефектов и кластеров на поверхности кристаллов ZnO при облучении электронами.

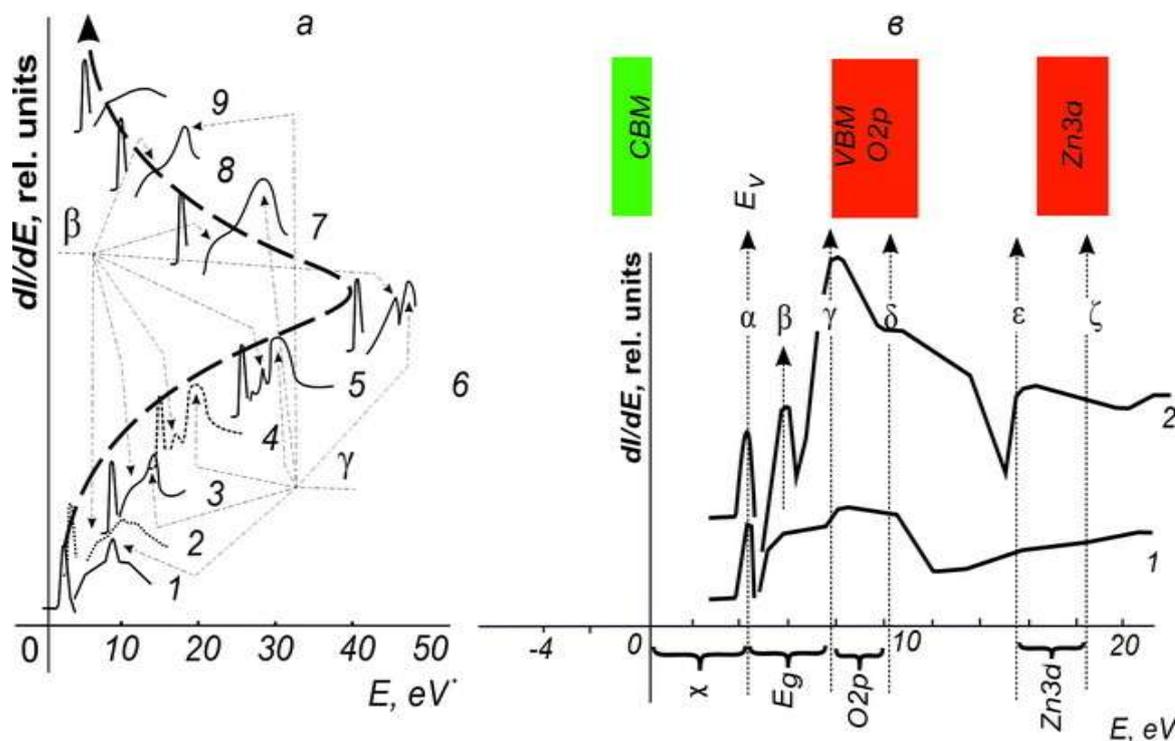
Обсуждаются результаты формирования спектров ПТ поли и монокристаллов оксида цинка (рис.6а). Возникновение пиков при энергии $3,5\text{эВ}$ (пик γ) показывает ширину запрещенной зоны, который связано с

возбуждением валентных электронов ZnO в зону проводимости образца. Также из спектра можно сказать, на поликристаллическом ZnO широкий пик при энергии 1,8-2,0эВ (пик β) показывает скопление вакансий кислорода на поверхности образца.

Анализ спектров ПТ двух кристаллов показывает, что в поликристаллическом образце интенсивность пиков очень слабая за счет рассеяния электронов в поликристаллической решетке. Пик при энергии 8 эВ (пик δ) в спектре ПТ монокристаллического ZnO показывает наличие атомов цинка на границе раздела с поверхностью, что указывает на полярную ориентацию (0001) ZnO. Показано, что на спектре ПТ поликристаллического ZnO широкий пик при энергии 1,8-2,0 эВ показывает большое скопление вакансий кислорода на поверхности образца. На спектре ПТ монокристаллического образца наблюдается узкий пик при этой энергии, что показывает на незначительное образование вакансий кислорода.

Также обсуждается образование зарядки на поверхности поли - и монокристаллов оксида цинка при облучении электронами.

Также на рис. 6в представлено энергетическая зависимость спектров ПТ ZnO. Также на кривой 1 наблюдается слабое формирование несколько пиков при энергиях возбуждения 2, 4, 6, 8, 12 и 14 эВ. Основные максимумы в спектрах обозначены буквами α , β , γ , δ .



Кривые: 1- спектры ПТ очищенной поверхности монокристаллов оксида цинка после отжига при температуре 400°С; 2- спектры ПТ при облучение электронами с энергией E_{obl} – 10 эВ; 3- E_{obl} – 20 эВ; 4- E_{obl} – 50 эВ; 5- E_{obl} – 75 эВ; 6- E_{obl} – 115 эВ; 7- E_{obl} – 120 эВ; 8- E_{obl} – 130 эВ; 9- E_{obl} – 150 эВ;

Рис. 6. Энергетическая зависимость спектров ПТ кристалла ZnO при облучении электронами.

Максимум β при энергии 2,0 эВ в спектре ПТ показывает наличие дорадиационных дефектов - вакансий кислорода на поверхностных слоях ZnO. Достаточно большое количество работ посвящено исследованию именно этого пика β в широкозонных кристаллах, в основном, в нелегированном ZnO, который расположен в области спектра, связанной с собственными дефектами в запрещенной зоне, и имеет максимум около 1,5-2,0 эВ.

Показано, что максимум δ при энергии 8 эВ в спектре ПТ монокристаллического ZnO свидетельствует о наличии атомов цинка на границе раздела с поверхностью, что указывает на полярную ориентацию образца (0001) ZnO. Структура при энергии больше 14 эВ может быть связана с изменением интенсивности дифракционных пучков. Также максимум γ при энергии ~3,2 эВ соответствует экситонному пику, который образуется за счет взаимодействия электронов зоны проводимости с дырками валентной зоны вследствие кулоновского взаимодействия.

Далее в энергетических зависимостях было обнаружено, что при облучение электронами с энергией $E \geq 1$ эВ всегда весь спектр ПТ ZnO смещается в сторону высоких энергий (толстая штриховая кривая), который показывал на появление отрицательной зарядки на поверхности. Облучение электронами проводилось с шагом 5 эВ, при каждой регистрации ПТ набиралась доза $1,5 \cdot 10^{13}$ эл/см². Этой дозы было достаточно для насыщения зарядки на поверхности. Зарядка вело себя очень стабильно, отжигать ее удалось при высоких температурах ($T > 300^\circ\text{C}$) или в течение нескольких часов (~3 часа) в высоком вакууме оно сама снималось. Вероятно, отрицательный поверхностный заряд связан с вакансиями кислорода. Поскольку ZnO является частично ионным кристаллом, и поэтому двойные слои в нем состоят из положительно и отрицательно заряженных ионов Zn и O.

Кривая 2 соответствует спектру ПТ поверхности ZnO, облученной электронами с энергией 10 эВ в течение 3 минут, в спектре уменьшается интенсивность максимумов β при энергиях 2,0 эВ, который соответствует по нашим данным вакансиям кислорода на поверхности. Наблюдается смещение спектра на 3 эВ. Далее при энергиях облучения 20 эВ (кривая 3) увеличивается интенсивность максимума β , также исчезает максимум δ при энергии 8 эВ. Также исчезновение со спектров ПТ максимума δ при энергии 8 эВ, указывает на снижение концентрации атомов цинка на границе раздела, и доминирование атомов кислорода на поверхности (максимума ϵ при энергии 12 эВ). При этом видно резкое изменение смещение спектра на 12 эВ. Кривая 4 показывает спектр ПТ ZnO при облучении 40 эВ. Смещение спектра составляет 17 эВ.

Экситонный пик (максимум γ при энергии 3,2 эВ) наблюдается на всех спектрах. Зависимость потенциала поверхности от энергии электронов показывает (толстая штриховая кривая), что облучение электронами приводит к появлению зарядки на поверхности до 43 эВ. При энергиях облучения 120 эВ зарядка поверхности резко падает до 18 эВ (кривая 7-9), а при этих энергиях наблюдается деградация поверхностной структуры. Снижение потенциала

поверхности, видимо связано с десорбцией ионов кислорода, так как при этих энергиях увеличивается коэффициент электронно-стимулированной десорбции (ЭСД) кислорода, что приводит к снижению величины отрицательной зарядки на поверхности ZnO. При облучении кристалла ZnO электронами с энергией 130 эВ потенциал поверхности снижается на 10 эВ, при 150 эВ на 8 эВ, далее до 300 эВ заметно не изменяется.

Проведенное исследование дефектообразования на поверхности кристаллов оксида цинка с применением низкоэнергетических электронов показывает, при энергиях облучения $1 < E < 20$ эВ образование отрицательной зарядки за счет захвата электронов на вакансии кислорода.

При энергиях $E \geq 20$ эВ образуются анионные вакансии при многократной ионизации атомов цинка. Определен энергетический порог образования вакансии аниона (~ 20 эВ) на поверхности ZnO.

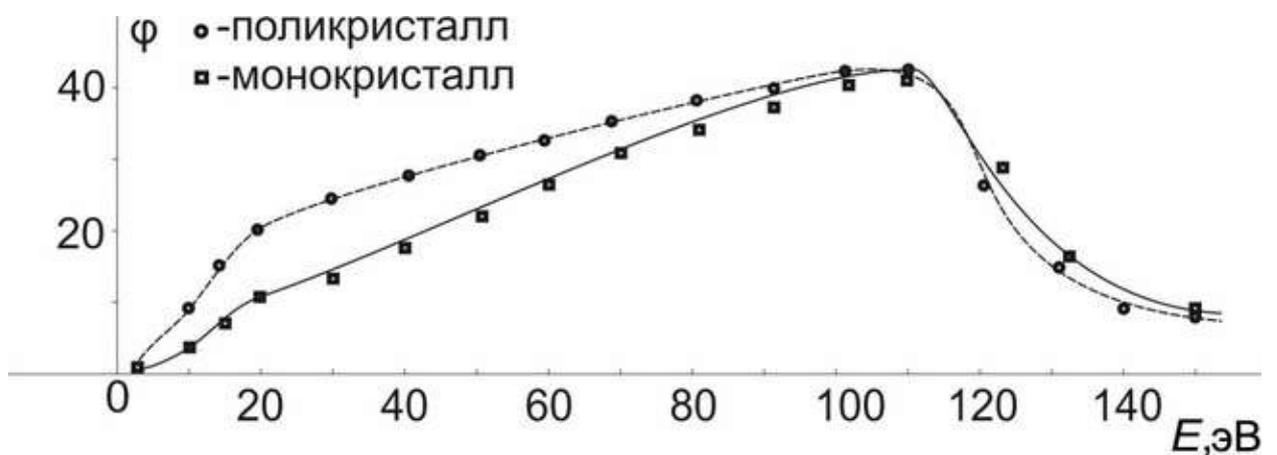


Рис. 7. Зависимость изменения отрицательного потенциала поверхности поли и монокристалла ZnO от энергии облучения электронами.

Облучение электронами энергией свыше $E > 120$ эВ приводит к снижению величины отрицательного потенциала поверхности, может быть, за счет ЭСД кислорода или за счет увеличения коэффициента вторичной электронной эмиссии.

Наблюдаемые в эксперименте кинетические характеристики зарядки кристалла ZnO связаны с модификацией его поверхности и генерацией радиационно-стимулированных дефектов, являющихся ловушками для электронов. Вероятно, отрицательный поверхностный заряд связан с вакансиями кислорода.

На рис. 7 приведено изменение отрицательного потенциала поверхности кристалла оксида цинка в зависимости от энергии облучения первичными электронами. Как видно, значение отрицательной зарядки, накапливающейся на поверхности, увеличивается до 43 эВ, после энергии облучения первичными электронами 120 эВ начинает падать, но отрицательный потенциал на поверхности не исчезает. Как видно из рис. 7, отрицательный потенциал на поверхности поли - и монокристалла оксида цинка ведет себя по-разному. Он зависит от кристаллографической ориентации атомов и их

кластеров на поверхности.

Из полученных спектров ПТ показано, что на поверхности оксида цинка наблюдаются дорадиационные вакансии и их образовании после облучения электронами. Также исследованы кинетическая, энергетическая и температурная зависимость.

На рисунке 8 приведена энергетическая зависимость относительной интенсивности пика 2,0 эВ – вакансии кислорода на поверхности кристалла ZnO от энергии облучения электронами. Как видно, до облучения электронами с энергией 20эВ интенсивность пика вакансий значительно не увеличивается. Это указывает на существование дорадиационных дефектов на поверхности оксида цинка. С увеличением энергии на 20 эВ происходит резкий скачок интенсивности примерно в 2 раза, который можно связать с образованием вакансий за счет электронного облучения.

Энергетическую область участка можно разделить на две: 1 и 2 область облучения электронами. В первой области участвуют вакансии, уже существующие (дорадиационные) на поверхности оксида цинка, здесь энергия электрона недостаточна для создания вакансий. На второй области участка облучения участвуют и дорадиационные, и образовавшиеся вакансии при облучение электронами с энергией 20 эВ. Далее увеличение энергии облучения электронами не приводит к усилению образования вакансий кислорода, что указывает на порог образования вакансий кислорода на поверхности кристалла оксида цинка. Таким образом, из графика видно, что энергия облучения 20 эВ для оксида цинка является порогом для образования дефектов на поверхности, ниже этой энергии электроны не могут создать электронно дырочные пары.

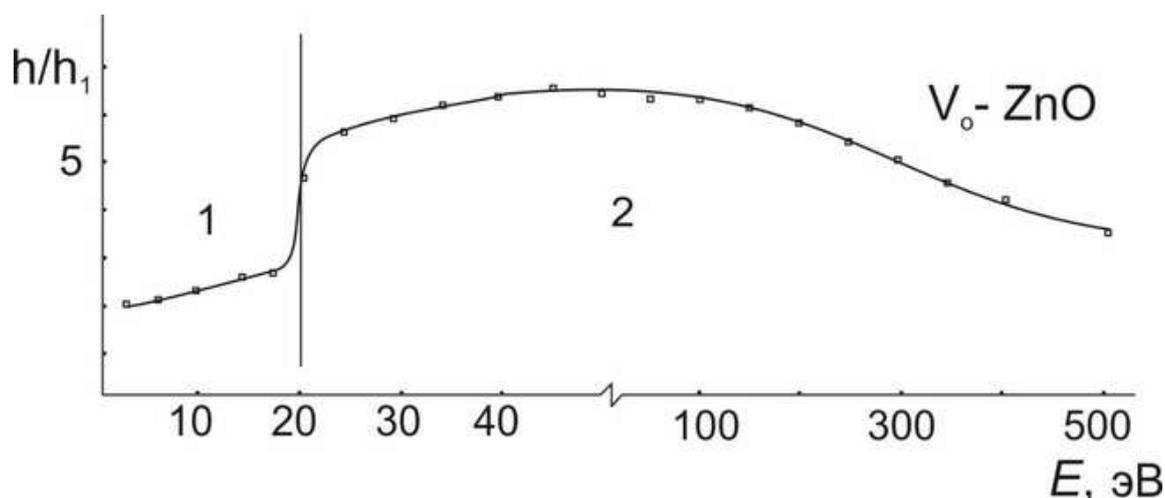


Рис. 8 Энергетическая зависимость относительной интенсивности пика 2,0эВ – вакансии кислорода на поверхности кристалла ZnO при облучении электронами

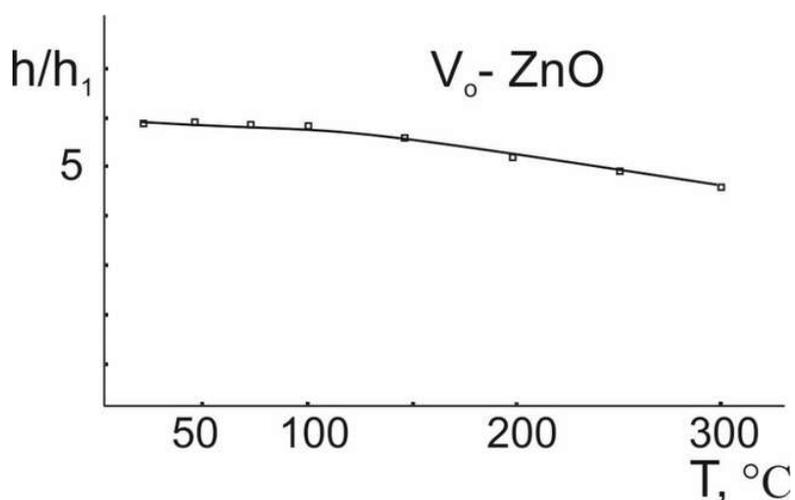


Рис. 9. Температурная зависимость относительной интенсивности пика 2,0эВ – вакансии кислорода на поверхности кристалла ZnO

На рисунке 9 приведена температурная зависимость относительной интенсивности пика 2,0эВ – вакансии кислорода на поверхности кристалла ZnO. Как видно, с увеличением температуры от комнатной до 300°C, интенсивность пика 2,0эВ заметно не изменяется, это не характерное поведение для вакансий. Как стало ясно из температурной зависимости, вакансии кислорода до 300°C не отжигаются. Также по кинетике относительной интенсивности пика 2,0эВ – вакансии кислорода на поверхности кристалла ZnO в течение 4 часов падает в два раза, в течении 8 часов в пять раз, дальше кинетика вакансий заметно не меняется. Только таким образом можно снизить концентрацию вакансий кислорода на поверхности, но получить полное удаление вакансий с поверхности невозможно. Таким образом, из графиков видно, что обнаруженный пик 2,0эВ в спектре ПТ действительно принадлежит вакансиям кислорода на поверхности кристалла оксида цинка. Оно очень стабильное реагирует на температуру и на время отжига.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Проведена модернизация экспериментальной сверхвысоковакуумной установки спектроскопии ПТ, при которой можно достигать энергии электронов до 1000эВ, а энергии ионов до 3000эВ, и предложено методика исследования кристаллов ZnO, SiO_x/Si(111) и LiF, позволяющая проводить комплексные исследования распыления, дефектообразования, изменения работы выхода и зонной структуры поверхности при одинаковых условиях.
2. Впервые в процессе облучения щелочно-галогидных кристаллов показано, что распыление поверхности происходит за счет механизма «Defect Mediated Sputtering». Предложено методика определения дефектов во вторичном кластере по масс-спектрам, из которой следует, что 80% вторичных ионов в своем составе содержат атомы, распыленных с дефектов структуры поверхности. Показано, что образованные на

поверхности щелочно-галогидных кристаллов дефекты стимулируют процесс распыления и при этом вместе эмитируют с поверхности со вторичными ионами.

3. Впервые проведены исследования образования дефектов в кристалле LiF при бомбардировке суб-кэВными электронами и ионами методом спектроскопии ПТ. Показано, что при этом работает электронный и ударный механизм образования дефектов, при котором наблюдается образование поверхностных V-центров, при энергии возбуждения 3,6 эВ - идентифицирован как скопление кластеров атомов галогена.
4. Впервые проведены исследования методом спектроскопии ПТ образования поверхностных дефектов на кристалле LiF на Si, в зависимости от массы первичных ионов. Экспериментально и теоретически показана физическая закономерность образования дефектов на поверхности и в объеме кристалла в зависимости от массы первичного иона, согласно которой, с увеличением массы первичного иона образуется больше вакансий и междоузельных дефектов на поверхности, чем в объеме кристалла. Для ионов с наименьшей массой распределение дефектов внедрения больше на поверхности, чем в объеме кристалла.
5. Впервые при облучении отрицательными ионами хлора поверхности кремния наблюдалась интенсивное окисление поверхности образца за счет окислительных свойств хлора.
6. Впервые методом спектроскопии ПТ обнаружен поверхностный кислородно дефицитный центр при энергии возбуждения 0,5-1,0 эВ на поверхности кристалла кремния. Показано, что концентрация кислородно дефицитных центров на поверхности кремния влияет на скорость окисления поверхности. Впервые получена атомарно чистая поверхность кремния в процессе отжига при температуре 650°C в течение 10 минут при облучении ионами цезия с последующим отжигом при давлении остаточных газов вакуума 10^{-9} Торр.
7. Впервые исследовано влияние пучка низкоэнергетических электронов на поверхность кристаллов оксида цинка: показано, что при энергиях облучения $1 < E < 20$ эВ идёт образование отрицательной зарядки за счет захвата электронов на вакансии кислорода.
8. В интервале энергий $20 \text{ эВ} \leq E \leq 120 \text{ эВ}$, наблюдается усиление отрицательной зарядки за счет разрыва связей кластера ZnO на положительные Zn^+ и отрицательные O- ионы, что приводит к образованию на поверхности двухслойной зарядки, с внешней стороны поверхности покрыта отрицательными ионами кислорода. Определён энергетический порог образования вакансии аниона (~ 20 эВ) на поверхности ZnO.
9. Определено, что облучение электронами энергией свыше $E > 120$ эВ приводит к снижению величины отрицательного потенциала поверхности. Наблюдаемые в эксперименте кинетические характеристики зарядки кристалла ZnO связаны с модификацией его

поверхности и генерацией радиационно-стимулированных дефектов, являющихся ловушками для электронов.

10. Впервые показано, что отрицательный потенциал на поверхности можно использовать как технологический параметр, от которого наиболее сильно будет зависеть совершенство кристаллической структуры получаемых пленок. Зарядка поверхности подложки электронами приводит к образованию определенных дефектов решетки, а также определяет взаимную координацию, для кристаллизации последующих слоев пленки.
11. Методом нелинейного регрессионного анализа получены математические модели образования и распада дефектов на поверхности широкозонных кристаллов. Полученные модели дают возможность прогнозировать недостающие интервалы температур образования, агрегации и распада дефектов в других материалах.
12. Исследование поверхностных дефектов в широкозонных кристаллах LiF, SiO₂, ZnO методом спектроскопии ПТ показывает, что они различаются продуктами радиолиза: если в LiF облучение вызывает большое скопление дефектов, в SiO_x приводит к очистке поверхности или окислению, а в ZnO облучение приводит к образованию поверхностной зарядки за счет дефектов поверхности. Установлены закономерности и взаимосвязи дефектов с поверхностными состояниями и с другими физическими процессами, происходящими на поверхности широкозонных кристаллов при электронном и ионном облучении.
13. Полученные в работе новые экспериментальные результаты позволяют решить ряд научных и технологических проблем, такие как влияние поверхностных дефектов на распыление, очистку, зарядку, окисление, и т.д. и способствуют дальнейшему углублению представлений о процессах поверхностного дефектообразования и могут быть использованы для развития теоретических моделей и механизмов. .

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARDING OF THE SCIENTIFIC
DEGREES DSc.30.05.2018.FM/T.65.01 AT INSTITUTE
OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES INSTITUTE**

**INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES
PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE**

SHAROPOV UTKIRJON BAHODIROVICH

**SURFACE DEFECTS IN WIDE BAND GAP CRYSTALS LiF, SiO₂,
ZnO**

01.04.04 – Physical electronics

**ABSTRACT OF DOCTORAL DISSERTATION (DSc) ON PHYSICAL AND
MATHEMATICAL SCIENCES**

TASHKENT – 2023

The subject of doctoral dissertation is registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2022.4.DSc/FM25.

Dissertation has been prepared at the Institute of ion plasma & laser technologies and Physical-technical institute.

The abstract of the dissertation is posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the website (www.iplt.uz/) and the «Ziyonet» information and educational portal (www.ziyonet.uz/).

Scientific consultant: **Egamberdiev Bakhrom Egamberdievich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Official opponents: **Komolov Alexey Sergeevich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Maksimov Sergey Evlantievich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Nimatov Samad Jaysanovich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Leading organization: **National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek**

The defense will take place on « 8 » February 2023 at 14³⁰ at the meeting of the Scientific Council number DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 at the Institute of ion-plasma and laser technologies (Address: 100125, Uzbekistan. Tashkent city, 33, Durmon yuli str., Phone: (99871) 262-42-54, e-mail: info@iplt.uz).

The doctoral dissertation is can be looked through in the Information-Resource Centre of Institute of ion-plasma and laser technologies (is registered № 1) (Address: 100125, Uzbekistan. Tashkent city, 33, Durmon yuli str., Phone: (99871) 262-32-54.

The abstract of the dissertation is sent out on «27» January 2023.
(Mailing report № 1 on «27» January 2023).



K.B.Ashurov

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

I.D.Yadgarov

Scientific Secretary of Scientific Council on Award of Scientific Degrees, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, senior resercher

B.E. Umirzaqov

Chairman of scientific Seminar under Scientific Council on Award of Scientific Degrees. Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

INTRODUCTION (abstract of DSc thesis)

The aim of the research work is to **research** the laws of the formation of surface defects in wide band-gap crystals during electron and ion irradiation, as well as to establish the relationship of defects with surface states and with other physical processes occurring on the surface.

The objects of the research work are samples of wide band-gap crystals of lithium fluoride, silicon and zincum oxide.

Scientific novelty of the research work is as follows:

The ultrahigh-vacuum installation of total current spectroscopy was modernized;

For the first time, a technique has been developed for determining defects in a secondary cluster by mass spectra;

For the first time, studies of the formation of defects in a LiF crystal under electron bombardment in the energy range of 1–1000 eV were carried out by the method of total current spectroscopy. At irradiation above 600 eV, decomposition of the formed colloids and V-centers of the surface is observed;

During ion bombardment of the surface of a LiF crystal, it is shown that the formation of surface V-centers, at an excitation energy of 3.6 eV, is identified as an accumulation of clusters of halogen atoms;

For the first time, studies have been carried out by the method of total current spectroscopy of the formation of surface defects on a LiF crystal in Si, depending on the mass of primary ions;

Based on the TC spectra of oxidized and clean surfaces of silicon crystals, a relationship was established between surface defects and other processes occurring on the surface, such as adsorption, desorption, and oxidation;

For the first time, it was discovered that the silicon surface was cleaned from oxides under irradiation with positive ions; under irradiation with negative ions, intensive oxidation of the sample surface was observed;

For the first time, the method revealed a surface oxygen-deficient center, at an excitation energy of 0.5-1.0 eV, on the surface of a silicon crystal;

For the first time, the effect of a beam of low-energy electrons on the surface of zinc oxide crystals has been studied ($E=0\div 600$ eV). It is shown for the first time that the negative potential on the surface can be used as a technological parameter, on which the perfection of the crystal structure of the films obtained will depend most strongly;

It is shown that a two-layer charging model works on the surface of zinc oxide under electron bombardment;

Mathematical models of formation and decay of defects on the surface of wide band-gap crystals are obtained.

Implementation of the research results. Based on the results of a study of physical processes on the surface of wide band-gap crystals:

experimental results obtained in the study of the processes of surface oxidation of silicon at temperatures of 400°C - 1000°C were used in the implementation of scientific projects № AE4-FA-0-19520: "Implementation of technical refining of

silicon by recrystallization" performed in 2012-2013, and No. EF3-FA-0-25046 "diffusion during recrystallization with limited solubility and segregation coefficients", performed in 2014-2015. (Certificate of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan dated September 26, 2020 No. 2 / 1255-3372). The use of scientific results made it possible to measure with high accuracy the solubility and segregation on the surface of silicon; surface treatment by bombardment of silicon by ions and subsequent heat treatment at a temperature of 650°C;

experimental results obtained in the course of research related to the implantation of ions in a silicon crystal, as well as charge accumulation on the surface of zinc oxide crystals, were used in the development of power diodes and LEDs (certificate of the Association "UZELTECHSANOAT" № 04-4 / 1054 of August 1, 2020). The use of scientific results has improved the efficiency of products in the development of power diodes and LEDs;

experimental and theoretical results obtained during the study of the effect of hybridization and oxidation of the silicon surface were used in further studies of other samples consisting of metal nanoparticles in foreign journals with a high impact factor (Materials 2022, V. 15, Scopus, IF - 3.78; Energy Technology 2022, V.10, Scopus, IF - 4.149; Physica B Condensed Matter 2022, V.639, Scopus, IF - 2.988). The use of scientific results has allowed the development of methods for synthesizing and predicting two-dimensional semiconductors, which are an alternative to thermoelectric, photovoltaic solar cells, next-generation optoelectronic devices due to their exceptional properties based on metal and oxide 2D materials;

The structure and volume of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion and a list of quoted literature. The text of the thesis is set out on 207 pages, including 53 figures and 7 tables.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (часть I, part I)

1. Sharopov, U. B.; Kaur, K.; Kurbanov, M. K.; Saidov, D. S.; Nurmatov, S. R.; Sharipov, M. M.; Egamberdiev, B. E. Comparison of Electron Irradiation on the Formation of Surface Defects in Situ and Post Thin-Film LiF/Si(111) Deposition. // Thin Solid Films, 2021, 735, 138902. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2021.138902> (Scopus: IF = 3,8)
2. Sharopov, U. B.; Kaur, K.; Kurbanov, M. K.; Saidov, D. S.; Juraev, E. T.; Sharipov, M. M. Controlling the Low-Temperature Ionic Purification of a Silicon Surface by Electron Spectroscopy // Silicon, 2022, 14 (9), 4661–4667. <https://doi.org/10.1007/s12633-021-01268-0> (Scopus: IF = 3,3)
3. Wani, A. F.; Rani, B.; Sharopov, U. B.; Dhiman, S.; Kaur, K. Thermoelectric Investigation of Transition Metal Oxide NiO₂: A First Principles Study // Int. J. Energy Res., 2022, <https://doi.org/10.1002/er.7741> (Scopus: IF = 5,164)
4. Kaur, K.; Khandy, S. A.; Dhiman, S.; Sharopov, U. B.; Singh, J. Computational Prediction of Thermoelectric Properties of 2D Materials // Electron. Struct., 2022, 4 (2), 023001. <http://dx.doi.org/10.1088/2516-1075/ac635b> (Scopus: IF = 1,2)
5. Sharopov, U.; Kaur, K.; Kurbanov, M.; Avezov, N.; Juraev, T.; Egamberdiev, B.; Rashidov, K.; Turapova, D. Influence of the Irradiation of Ions of Different Mass on the Formation of Surface Defects of Lithium Fluoride Thin Films // Surf. Interface Anal., 2022, 54 (10), 1052–1059. <https://doi.org/10.1002/sia.7130> (Scopus: IF = 2,1)
6. Wani, A. F.; Rani, B.; Dhiman, S.; Sharopov, U. B.; Kaur, K. SiH Monolayer: A Promising Two-Dimensional Thermoelectric Material // Int. J. Energy Res., 2022, 46 (8), 10885–10893. <https://doi.org/10.1002/er.7889> (Scopus: IF = 5,164)
7. Sharopov U.B. Electron spectroscopy of defects on the surface silicon dioxide // Electronic journal of actual problems of modern science, education and training. 2021 -11/2, p.37-43.
8. Sharopov U.B. Influence of the atomic mass of bombardment ions on the formation of defects in silicon crystals // Electronic journal of actual problems of modern science, education and training. 2021 -12/1, p.82-90.
9. Шаропов У.Б. Спектроскопии полного тока окисленного кремния // Узбекский физический журнал. 2021, V.23. №4. с. 38-44. DOI: <https://doi.org/10.52304/v23i4.287>
10. Шаропов У.Б. Образование внедренных дефектов на поверхности кристаллов Si(111) и SiO_x при распылении ионами // IIm sarchashmalari 2022, №3, с. 7-12.
11. Шаропов У.Б. Влияние морфологии на эффект зарядки поверхности кристаллов оксида цинка // IIm sarchashmalari, 2022, №2, с. 10-15.

12. Шаропов У.Б. Спектроскопия полного тока поли и монокристаллического оксида цинка // Узбекский физический журнал. 2022, V.24. №1. с. 62-67.
13. Эгамбердиев Б.Э., У.Б. Шаропов, Н. Норкулов Образование дефектов на поверхности кристаллов LiF при бомбардировке ионами хлора // Euroasian Journal of Semiconductors Science and Engineering, 2021, Том 3 Выпуск 5 с. 16-25
14. Шаропов У.Б. Исследование образования дефектов на поверхности кристаллов LiF при бомбардировке ионами цезия // Узбекский физический журнал. 2022, V.24. №2. с. 144-149.

Свидетельства об официальной регистрации программы для ЭВМ

15. Стельмах В.Г., Шаропов У.Б., Ядгаров И.Д. «Программа для создания текстового файла TRIM.DAT, задающего характеристики падения ионов (trim.org)» Свидетельства об официальной регистрации программы для ЭВМ, Агентство по интеллектуальной собственности Республика Узбекистан. №DGU 20191015, от 26.08.2019 Ташкент (2019).

И бўлим (II часть, part II)

16. Sharopov U.B., Egamberdiev B.E., Yusupov J.B., Kurbanov M.K., Saidov D.Sh., Nurmatov Sh. R., Sharipov M.M. Modernization of total current spectroscopy // Namangan Institute of Engineering and Technology an international scientific-practical conference "The role of advanced innovative technologies and education in solving problems of automation and energy" June 24-25, 2021, p.63-65.
17. Sharopov U.B., Egamberdiev B.E., Yusupov J.B., Kurbanov M.K., Saidov D.Sh., Nurmatov Sh. R., Sharipov M.M. Surface defects in situ thin-film LiF/Si(111) deposition under electron irradiation // Namangan Institute of Engineering and Technology an international scientific-practical conference "The role of advanced innovative technologies and education in solving problems of automation and energy" June 24-25, 2021, p.59-61.
18. Sharopov U.B., Egamberdiev B.E., Yusupov J.B., Kurbanov M.K., Saidov D.Sh., Nurmatov Sh. R., Sharipov M.M. Formation of surface defects in post thin-film LiF/Si(111) deposition under electron irradiation // Namangan Institute of Engineering and Technology an international scientific-practical conference "The role of advanced innovative technologies and education in solving problems of automation and energy" June 24-25, 2021, p.61-63.
19. Шаропов У.Б. Bombardment of ions of with different mass of lithium fluoride crystals // IPEC-8, Eighth International Conference on Physical Electronics, September 23-24, 2021, Ташкент, Узбекистан. С.31
20. Шаропов У.Б. Preparing the technique of the total current spectroscopy for the growth of LiF on Si(111) // IPEC-8, Eighth International Conference on Physical Electronics, September 23-24, 2021, Ташкент, Узбекистан. С.70.

21. Шаропов У.Б. Electron irradiation during thin-film LiF/Si(111) deposition // IPES-8, Eighth International Conference on Physical Electronics, September 23-24, 2021, Ташкент, Узбекистан. С.43.
22. Sharopov U.B. Electron spectroscopic control of surface cleaning of silicon substrates // XIII Международная Конференция «Кремний-2020» Республика Крым, г. Ялта, 21–25 сентября 2020 г.
23. Шаропов У.Б. Электронная спектроскопия поверхности очищенного кремния // VIII Международная Конференция «Лазерные, Плазменные Исследования и Технологии» ЛАПЛАЗ-2022, 22-25 март, Москва, ст.461.
24. Шаропов У.Б. Kinetics of oxygen vacancy on the surface of ZnO crystals // IPES-8, Eighth International Conference on Physical Electronics, September 23-24, 2021, Ташкент, Узбекистан. С.44.

Босишга рухсат этилди: 30.08.2018 йил Бичими 60x45 ¹/₈, «Times New Roman» гарнитурда рақамли босма усулида босилди.
Шартли босма табағи 3,9. Адади: 100. Буюртма: № 281.

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

«АКАДЕМИЯ НОШИРЛИК МАРКАЗИ»
Давлат унитар корхонасида чоп этилди.