

**NAMANGAN MUHANDISLIK-TEXNOLOGIYA INSTITUTI HUZURIDAGI
ILMIY DARAJALAR BERUVCHI PhD.03/30.11.2022.FM/T.66.04 RAQAMLI
ILMIY KENGASH**

ANDIJON DAVLAY UNIVERSITETI

YULDASHEVA NAZOKATXON MUROD QIZI

**KREMNIY XUSUSIYATLARIGA METALL NANOZARRACHALAR
TA'SIRINI TADQIQ QILISH**

01.04.10 – Yarimo'tkazgichlar fizikasi

**FIZIKA-MATEMATIKA FANLARI BO'YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

Namangan-2023

**Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD)
dissertatsiyasi avtoreferati mundarijasi**

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

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

Yuldasheva Nazokatxon Murod qizi

Kremniy xususiyatlariga metall nanozarrachalar ta'sirini tadqiq qilish..... 3

Юлдашева Назокатхон Мурод кизи

Исследование влияния металлических наночастиц на свойства кремния. 21

Yuldasheva Nazokatxon Murod qizi

Investigation of the effect of metal nanoparticles on silicon properties..... 39

E'lon qilingan ishlar ro'yxati

Список опубликованных работ

List of published works..... 43

**NAMANGAN MUHANDISLIK-TEXNOLOGIYA INSTITUTI HUZURIDAGI
ILMIY DARAJALAR BERUVCHI PhD.03/30.11.2022.FM/T.66.04 RAQAMLI
ILMIY KENGASH**

ANDIJON DAVLAY UNIVERSITETI

**YULDASHEVA NAZOKATXON MUROD QIZI
KREMNIY XUSUSIYATLARIGA METALL NANOZARRACHALAR
TA'SIRINI TADQIQ QILISH**

01.04.10 – Yarimo'tkazgichlar fizikasi

**FIZIKA-MATEMATIKA FANLARI BO'YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

Namangan-2023

Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalari vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2022.4.PhD/FM823 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiya Andijon davlat universitetida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengash veb-sahifasiga (www.nammti.uz) va Ziyonet Axborot-ta'lim portalida (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

Ilmiy rahbar:

Zaynabidinov Sirojiddin Zaynabidinovich
fizika-matematika fanlari doktori, O`zR FA akademigi

Rasmiy opponentlar:

Gulyamov Gafur
fizika-matematika fanlari doktori, professor

Nasirov Abdumanap Abdulmajidovich
fizika-matematika fanlari nomzodi, dotsent

Yetakchi tashkilot:

Farg'ona davlat universiteti

Dissertatsiya himoyasi Namangan muhandislik-texnologiya instituti huzuridagi ilmiy darajalar beruvchi PhD.03/30.11.2022.FM/T.66.04 raqamli Ilmiy kengashning 2023 yil “__” _____ soat ____ dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 160115, Namangan shahri, Kosonsoy ko'chasi, 7-uy. Tel./faks: (99869) 225-10-07; (99869) 225-76-75, e-mail: niei_info@edu.uz, Namangan muhandislik-texnologiya instituti 3-bino, 2-qavat, ilmiy kengash xonasi).

Dissertatsiya bilan Namangan muhandislik-texnologiya institutiining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin. (_____raqam bilan ro'yxatga olingan.) Manzil: 160115, Namangan shahri, Kosonsoy ko'chasi, 7-uy. Tel: (99869) 225-10-07.

Dissertatsiya avtoreferati 2023 yil “__” _____da tarqatildi.
(2023 yil «__” _____dagi № _____ raqamli ryestr bayonnomasi.)

U.I.Erkafoyev

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash raisi, f.-m.f.d., dotsent

B.X. Qo'chqorov

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash ilmiy kotibi, PhD, dotsent

N.Yu.Sharibayev

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash qoshidagi ilmiy seminar raisi, f.-m.f.d., professor

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasining annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Jahonda energiya resurslariga bo‘lgan talabning tobora ortib borishi va global ekologik muammolarning keskinlashuvi qayta tiklanuvchi energiya manbalaridan foydalanishni jadal kengaytirishni talab qilmoqda. Shuning uchun ekologik toza qayta tiklanuvchi energiya manbalari – yarimo‘tkazgichli fotoelektrik energiya o‘zgartirgichlar samaradorligini oshirish bo‘yicha bir qator ilmiy va amaliy tadqiqotlar amalga oshirilmoqda. Fotoelektrik energiya o‘zgartirgichlar yuzasiga tushadigan yorug‘lik oqimining yutilishini ko‘paytirish, yuqori samarali fotovoltaik quvvat qurilmalari uchun yangi istiqbolli mono- va polikristalli tuzilmalar olish, ularning elektrofizik va fotoelektrik xususiyatlarini o‘rganish, shuningdek energiya manbalaridan foydalanishning o‘ziga xos imkoniyatlarini o‘rganish shu kunning dolzarb muammolaridan biridir.

Jahonda hozirgi kunda zamonaviy mikroelektronika asboblari va fotoelektrik qurilmalarning xususiyatlarini yaxshilash, ularning tez ishlashi va yuqori samaradorlikka ega bo‘lishlarini ta‘minlash uchun eng so‘nggi fan va texnologiya yutuqlaridan samarali foydalangan holda kremniyning xususiyatlarini tubdan yaxshilashga katta ahamiyat qaratilmoqda. Bu borada maqsadli ilmiy tadqiqotlarni olib borish, jumladan mavjud mikroelektronika asboblarning funksional imkoniyatlarini iste‘molchilarning zamonaviy ehtiyojlariga moslab rivojlantirishga harakat qilinmoqda. Buning uchun dastlabki bazaviy materiallarning xususiyatlarini tubdan o‘zgartirib borish, kremniyning optik xususiyatlarini, sezgirligi va tez ishlash xususiyatlarini tubdan yaxshilash, uning hajmida yutiluvchi fotonlar energetik spektrini kengaytirish va kremniy asosida yaratilgan fotoelektrik asboblarning samaradorligini oshirish uchun kremniy sirtiga nanoo‘lchamli metall zarrachalarni kiritib tadqiq etish, nanozarrachalarning kremniy hajmida kechadigan optik yutilishi, nomuvozanatli zaryad tashuvchilar ko‘chishi va generatsiya-rekombinatsiya jarayonlarilarning fizik mexanizmlarini aniqlash dolzarb vazifalardan hisoblanadi.

Respublikamizda ilm-fanni rivojlantirishga, jumladan, yarimo‘tkazgichli materiallar xususiyatlariga metall nanozarralar ta‘sirini tadqiq etishga alohida e‘tibor qaratilib, muayyan natijalarga erishilmoqda. 2022-2026 yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasida, jumladan “Iqtisodiyotni elektr energiyasi bilan uzluksiz ta‘minlash hamda “Yashil iqtisodiyot” texnologiyalarini barcha sohalarga faol joriy etish, iqtisodiyotning energiya samaradorligini 20 foizga oshirish”¹ kabi bir qator vazifalar belgilab berilgan. Ushbu vazifalarni amalga oshirish, jumladan turli yarimo‘tkazgichli asboblari va quyosh elementlarining negizi bo‘lgan kremniyda metall nanozarrachalarning optik yutilishi, nomuvozanatli zaryad tashuvchilar generatsiyasi va rekombinatsiyasi, *p-n*-o‘tish maydonida zaryad ko‘chish jarayonlarining fizik mexanizmlarini raqamli modellashtirishga tayangan nazariy

¹O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022 yil 28 yanvardagi PF-60-son “2022-2026 yillarga mo‘ljallangan yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi” to‘g‘risidagi Farmoni

hisoblashlar orqali tadqiq etish muhim amaliy ahamiyatga ega bo'lgan dolzarb vazifalardan biridir.

O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son «2022-2026 yillarga mo'ljallangan Yangi O'zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to'g'risida»gi Farmoni, 2020-yil 10-iyuldagi PQ-4779-son «Iqtisodiyotning energiya samaradorligini oshirish va mavjud resurslarni jalb etish orqali iqtisodiyot tarmoqlarining yoqilg'i-energetika mahsulotlariga qaramligini kamaytirishga doir qo'shimcha chora-tadbirlar to'g'risida»², 2021-yil 9-apreldagi PQ-5063-son «O'zbekiston Respublikasida qayta tiklanuvchi va vodorod energetikasini rivojlantirish chora-tadbirlari to'g'risida», 2018-yil 17-iyulidagi PQ-3855-sonli "Ilmiy va ilmiy-texnikaviy faoliyat natijalarini tijoratlashtirish samaradorligini oshirish bo'yicha qo'shimcha chora-tadbirlar to'g'risida"gi³, 2018-yil 6-avgustdagi PQ-3899-sonli "Ilmiy va innovatsion faoliyatni integratsiyalash tizimining samaradorligini oshirish bo'yicha chora-tadbirlar to'g'risida"gi, 2021-yil 19-martdagi PQ-5032-sonli "Fizika sohasidagi tahlil sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish choratadbirlari to'g'risida"gi qarorlari hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa mehyoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishga ushbu dissertatsiya tadqiqoti muayyan darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining ustivor yo'nalishlariga mosligi. Mazkur dissertatsiya tadqiqoti O'zbekiston Respublikasida fan va texnologiyalarni rivojlantirishning ustivor yo'nalishlariga, hususan, "III. Qayta tiklanuvchi energiyalarni rivojlantirish" – amaliy tadqiqotlar davlat dasturi doirasidagi: PPI-3, "Energetika, energiya va resurs tejamkorligi, transport, mashina va asboblarni qurilishi, zamonaviy elektronika, mikroelektronika, elektron asboblarni qurilishini rivojlantirish" ustivor yo'nalishiga mos keladi.

Muammoning o'rganilganlik darajasi. Yorug'lik energiyasini elektr energiyasiga aylantirishda kremniy eng asosiy xom ashyo hisoblangani uchun yarimo'tkazgichlarda kechadigan fizik jarayonlarni tadqiq qilish va boshqarish bo'yicha ilmiy tadqiqotlar dunyoning yetakchi ilmiy markazlari hamda oliy o'quv yurtlari olimlari tomonidan juda katta qiziqish bilan o'rganib kelinmoqda. Xususan jahonning yetuk olimlaridan A.L.Efros, J.I.Alferov, A.M.Brodskiy, Yu.Ya.Gurevich, V.V.Klimov, S.L.Mayer, E.L.Nolle, I.V.Protsenko, T.A.Vartanyan, M.L.Brongersma, K.R.Catchpole, V.A.Milichko va boshqa qator tadqiqotchilar tomonidan yarimo'tkazgichli nanotuzilmalar va nanozararacha kiritilgan kremniy asosli fotoelektrik o'zgartirgichlar ishlab chiqish bo'yicha chuqur ilmiy izlanishlar olib borilmoqda.

O'zbekiston Respublikasining ilmiy maktab vakillari akademiklar R.A.Mo'minov, M.S.Baxodirxonov, S.Zaynobidinov, A.S.Saidov, professorlar R.Ya.Rasulov, K.P.Abduraxmonov, E.Z.Imamov, G.Gulyamov, K.Ismailov, R.Aliev va boshqalar tomonidan Ni, Rh, Mn, Cu, Pt, Au, Ag, Ti kabi ko'plab nanozaralarni kremniyning elektrofizik, rekombinatsion, fotoelektrik va boshqa xususiyatlariga

² O'zbekiston Respublikasi Prezidentining qarori, 10.07.2020 yildagi PQ-4779-son

³ O'zbekiston Respublikasi Prezidentining Qarori, 14.07.2018 yildagi PQ-3855-son

hamda kremniy asosidagi quyosh elementlarining asosiy fotoelektrik parametrlariga ta'sirlari keng o'rganilgan.

I.V.Protsenko va uning shogirdlari tomonidan fotoemissiya samaradorligini oshirish uchun metall fotodetektorlar yuzasida mikro va nanostrukturalarni yaratishning o'ziga xos yechimlari topilgan va keng qo'llanilgan, V.V.Klimov va S.L.Mayerlar fotodetektorlarning samaradorligini oshirish uchun nanozarrachalarning plazmonik xususiyatlaridan foydalanishni taklif qilgan, LPR qo'zg'alganda metall nanozarrachalardan fotoemissiya samaradorligining oshishini eksperimental ravishda kuzatgan va undan fotodetektorlar samaradorligini oshirishda foydalanishni taklif qilganlar. Ammo, ushbu ishlarda nanozarrachalardan fotoemissiyani tizimli nazariy tahlil qilish va uning kesimini aniqlash amalga oshirilmagan. Shuningdek, kremniy asosli fotoo'zgartirgichlarga kiritilgan turli nanozarrachalarning o'lchamlari va turi, metallar dielektrik funksiyalarining tushayotgan yorug'lik to'liq uzunligiga bogliqligi hamda nanozarrachalarni kiritiladigan sohasini hisobga olgan holda o'tkazilgan ilmiy tadqiqot ishlari yetarlicha amalga oshirilmagan.

Dissertatsiya tadqiqotining disertatsiya bajarilgan oliy ta'lim yoki ilmiy tadqiqot muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari rejalari bilan bog'liqligi. Dissertatsiya ishi Andijon davlat universiteti Fizika kafedrasida ilmiy tadqiqot ishlari rejasining "Injeksion asboblarda va quyosh elementlari uchun ko'p qatlamli va polikristall strukturali yarimo'tkazgichlar olish va ularning elektrofizik xususiyatlarini o'rganish", "Qattiq jismlar elektrofizik xususiyatlarining ularga turli kirishmalar kiritish hamda tashqi ta'sirlar natijasida o'zgarishini nazariy va amaliy tadqiq etish" mavzulari hamda A-4-12 "Nanoplazmonika effekti va uning yordamida kremniyli p-n-strukturalarda fotoelektrik energiya olish samaradorligini oshirish" (2015-2017 yy., ilmiy rahbar prof. R.Aliyev) va OT-F2-68 "Kristallarda kirishma-nuqsonli mikro va nanobirikmalar hosil bo'lish mexanizmlari va ularning keng imkoniyatli ko'p qatlamli strukturalar yaratishdagi roli"(2017-2021 yy., ilmiy rahbar akad. S.Zaynobidinov) davlat ilmiy texnika loyihalari doirasida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi klassik va kvant fizikasi qonuniyatlariga tayangan holda, kremniyning optik va elektrofizik xususiyatlarini uning hajmiga kiritilgan metall nanozarrachalar orqali yaxshilash shartlarini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

fotoelektrik o'zgartirgichlar samaradorligini oshirish uchun kremniyga kiritilgan metall nanozarrachalar dielektrik funksiyalarining ularga tushayotgan yorug'likning to'liq uzunligiga bog'liqligini, ularning plazmonik parametrlarini hamda plazmonlarning uyg'onish shartlarini aniqlash;

metall nanozarrachalardan kremniyga fotoemissiya yuz berishi uchun eng maqbul metall turi va nanozarracha o'lchamini aniqlashning matematik modelini ishlab chiqish;

metall nanozarrachalardan kremniyga fotoemissiya kesiminining va nanozarracha ichidagi elektr maydon intensivligining tushayotgan yorug'likning to'liq uzunligiga bog'liqlik ifodalarini keltirib chiqarish;

“*Visual Basic*” dasturiy vositalari yordamida metall nanozarrachalar kiritilgan kremniyning asosiy fotoelektrik xossalarini kompleks tadqiq qilish imkonini beruvchi dasturlar ishlab chiqish.

Tadqiqotning ob’ekti raqamli texnologiya asosida modellashtirilgan nanozarrachalar kiritilgan kremniy.

Tadqiqotning predmeti raqamli texnologiya asosida modellashtirilgan turli metall nanozarrachalar kiritilgan monokristall kremniyning elektrofizik va optik xususiyatlari hisoblanadi.

Tadqiqot usullari sifatida “Eng kichik kvadratlar” usuli, kvant mexanikasining matematik apparati, “*Visual Basic*” dasturlash tizimi yordamida rasman ro’yxatdan o’tkazilgan EHM dasturiy mahsulotlari asosida raqamli modellashtirish usullaridan foydalanilgan.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

metall nanozarrachalar dielektrik funksiyalarini ularga tushayotgan yorug’likning to’lqin uzunligiga bog’liqligini hamda ularning zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi, relaksatsiya vaqti, elektr o’tkazuvchanligi kabi asosiy elektrofizik parametrlarini plazmonik parametrlarga bog’liq holda hisoblaydigan yangi ifodalar keltirib chiqarilgan;

metall nanozarrachalardan kremniyga fotoemissiya kesimining metall nanozarrachalar turiga va o’lchamiga bog’liqligi ko’rsatilgan hamda eng maqbul metall turi mis ekanligi va uning o’lchami ~ 4 nm bo’lishi kerakligi aniqlangan;

metall nanozarrachalardan kremniyga fotoemissiyada nanozarracha ichidagi elektr maydon intensivligi 20 martagacha ortishi va oltin nanozarrachasi uchun bu kattalik eng yuqori bo’lishi hamda fotoemission tokning maksimal qiymati oltin uchun eng katta ~ 3.5 mA/sm² bo’lishi aniqlangan;

kremniydagi $a=4$ nm radiusli metall (Cu) nanozarrachalarining fotoelektron emissiya va yutilish kesimlarining (σ) spektral bog’liqligini taqqoslash natijasida yutilayotgan fotonlarning $\sim 15\%$ fotoelektronlarga aylanishi aniqlangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

kvant o’lchamli effektlardan samarali foydalanishga imkon beradigan yangi konstruksiyali fotoelektrik o’zgartirgichlar tayyorlash uchun teksturalangan kremniy sirtlarida tekis taqsimlangan metall nanozarrachalarni hosil qilishning yangi usuli ishlab chiqilgan;

metall nanozarrachalarda harakatlanayotgan va yorug’lik ta’sirida kremniyga chiqishi mumkin bo’lgan elektronlar uchun eng maqul potensial ko’rinishini aniqlashda ixtiyoriy ko’rinishdagi potensial uchun Shredinger tenglamasini sonli yecha oladigan kompyuter dasturi yaratilgan;

metall nanozarrachalar dielektrik funksiyalarining ularga tushayotgan yorug’likning to’lqin uzunligiga bog’liqligi, ularning plazmonik va elektrofizik parametrlari hamda plazmonlarning uyg’onish shartlarini aniqlash uchun kompyuter dasturi yaratilgan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi: tadqiqotda modellashtirishning zamonaviy raqamli usullarini qo’llash, bajarilgan ishlarning mantiqiy yaxlitligi,

eksperimental olingan natijalar bilan hisoblangan natijalarning mosligi hamda o'lchash natijalarini qayta ishlashning umum qabul qilingan standart usullar bilan asoslanadi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati metall nanozarrachalar dielektrik funksiyalarining ularga tushayotgan yorug'likning to'lqin uzunligiga bog'liqligi, ularning plazmonik va elektrofizik parametrlari hamda plazmonlarning uyg'onish shartlari uchun olingan yangi ifodalar va nazariy hulosalar metall nanozarrachalar kiritilgan yarimo'tkazgichlarning fizik xususiyatlari haqidagi yangi bilimlarning chuqurlashishiga imkon berishi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati metall nanozarrachalar dielektrik funksiyalarining ularga tushayotgan yorug'likning to'lqin uzunligiga bog'liqligi, ularning plazmonik va elektrofizik parametrlari hamda plazmonlarning uyg'onish shartlari uchun olingan yangi ifodalar va nazariy hulosalar yarimo'tkazgichlar asosida tayyorlanadigan yangi plazmonik optoelektronik qurilmalarni yaratishda, shu jumladan quyosh fotoo'zgartirgichlarini, fotodetektorlarni, fotokatalizatorlar, datchiklar, nano o'lchamli LEDlar, kogerent nurlanishning miniatyurali (~44 nm) generatori – plazmon lazerlarni takomillashtirishda va molekulalarning floresensiyasini kuchaytirishda qo'llanilishi mumkinligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi: Raqamli texnologiyalarga tayangan holda modellashtirilgan va nanozarralar kiritilgan kremniyli fotoelektrik tuzilmalar konstruksiyalaridagi fotonlar yutilishi, asosiy bo'lmagan zaryad tashuvchilar fotogeneratsiyasi va ko'chishining fizik jarayonlarini tadqiq qilish asosida:

Nanozarrachalarni hosil qilishning "Fotoelektrik o'zgartirgich va uni tayyorlash usuli" nomli yangi usuli (Patent № IAP 06512 18.05.2021 yil) taklif qilingan. Bu usul kvant o'lchamli effektlardan samarali foydalanishga imkon beradigan yangi konstruksiyali fotoelektrik o'zgartirgichlar tayyorlash uchun teksturalangan kremniy sirtlarida tekis taqsimlangan metal nanozarrachalarni hosil qilish imkonini bergan.

"Foton" AJ da yaxshilangan parametrlarga ega bo'lgan fotoelektrik qurilmalar ishlab chiqarishda tadqiqotning raqamli hisoblash metodlari va tajriba natijalaridan foydalanilgan. (AJning 2022 yil 12 dekabrda № 352 raqamli ma'lumotnomasi). Natijada metall nanozarrachalar kiritish orqali fotoelektrik qurilmalarning samaradorligini oshirish imkoniyati yaratilgan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Dissertatsiyaning asosiy natijalari 6 ta xalqaro va 4 ta respublika ilmiy anjumanlarida ma'ruzalar qilinib, muhokamadan o'tkazilgan.

Dissertatsiya tadqiqoti natijalarining nashr qilinganligi. Dissertatsiya mavzusi bo'yicha jami 28 ta ilmiy ish nashr qilingan, ulardan 5 ta maqola O'zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasi tomonidan doktorlik dissertatsiyalarining ilmiy natijalarini nashr etish uchun tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda chop etilgan. Dissertatsiya ishi mavzusining natijasi sifatida 1 ta ixtiro uchun patent va 3 ta EHM dasturiy maxsulotlarining mualliflik guvohnomalari olingan.

Dissertatsiya tuzilishi va hajmi. Dissertatsiya ishi kirish, to'rtta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 120 sahifada bayon qilingan.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Dissertatsiyaning **kirish** qismida mavzuning dolzarbliligi asoslangan, muammoning o'rganilganlik darajasi bayon qilingan, tadqiqotning maqsadi va vazifalari shakllantirilgan, taqiqotning predmeti, ob'yekti va metodlari tavsiflangan, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari ko'rsatilgan hamda natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati izohlangan.

“Nanozarralar kiritilgan yarimo'tkazgichlarning xossalarini o'rganish bo'yicha olib borilgan tadqiqotlar” nomli dissertatsiyaning birinchi bobida fotoelektrik qurilmalarning samaradorligini oshirish bo'yicha olib borilayotgan tadqiqotlar, nanozarralarni sintez qilish usullari, xususan, qattiq jismlarda kimyoviy reaksiyalarga asoslangan usullar, nanokimyoy usullari, teskari mitsel usuli, metall nanozarrachalar va nanostrukturalar olishning nanolitografiya usuli, metall-tashqi muhit chegarasida yuzaga keladigan plazmonlar haqida ma'lumotlar berilgan.

Dissertatsiyaning **“Metall nanozarrachalarning dielektrik funksiyalari”** deb nomlangan ikkinchi bobda nanoplazmonlarni uyg'otish mexanizmlari, ixtiyoriy o'lchamli zarralar va nanozarralar uchun Maksvell tenglamalarini yechishning “ ϵ -metodi”lari tavsiflangan va nanoplazmonika uchun metallarning dielektrik funksiyalari uchun yangi ifodalar olingan. Bu ifodalar yordamida va “Eng kichik kvadratlar” usuli asosida ixtiyoriy metall nanozarralarning plazmon parametrlarini oson aniqlash usuli taklif etilgan.

Bir xil chastotalarda sirtiy plazmonning to'lqin vektori erkin fotonning to'lqin vektoridan katta bo'ladi va shuning uchun odatdagi fotonlar bilan sirtiy plazmonlarni uyg'otish mumkin emas². Sirtiy plazmonlar metall-tashqi muhit chegarasidagi muhitlardan birining dielektrik singdiruvchanligi manfiy bo'ladigan chastotalarda, ya'ni

$$\begin{aligned}\epsilon_M(\omega) \cdot \epsilon_g(\omega) &< 0, \\ \epsilon_M(\omega) + \epsilon_g(\omega) &< 0\end{aligned}\tag{1}$$

shartlar bajarilgandagina yuzaga keladi.

Shunday qilib, yarimo'tkazgichlar sirtiga kiritilgan metall nanozarrachalar o'zlariga tushayotgan elektromagnit nurlanishlarning chastotalarga qarab o'zlarini turlicha tutishadi. Shuning uchun kremniy sirtiga kiritilgan metall nanonazarralar hamda kompleks dielektrik singdiruvchanligining tushayotgan elektromagnit to'lqinlar chastotasiga (to'lqin uzunligiga) bog'liqligini o'rganish nanoplazmonikaning dolzarb muammolaridan biridir. Jumladan, elektr maydonining chegarada sakrab o'zgarishini hamda depolyarizatsiya va radiatsion yo'qotishlarni hisobga olishda metall nanozarralar hamda uning atrofidagi yarimo'tkazgichning dielektrik funksiyasi tushayotgan yorug'likning to'lqin uzunligiga kuchli bog'langan.

Ma'lumki, dielektrik singdiruvchanlikning real qismi to'lqin uzunligiga

$$\text{Re } \epsilon = \epsilon_\infty - \frac{(\lambda / \lambda_p)^2}{1 + (\lambda / \lambda_f)^2} = \epsilon_\infty - \frac{\lambda_f^2}{\lambda_p^2} \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + \lambda_f^2}\tag{2}$$

ifoda orqali bog‘langan. Bu ifodani λ (λ^2) ning darajalari bo‘yicha Teylor qatoriga yoysak,

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \varepsilon &= \varepsilon_{\infty} - \frac{\lambda_f^2}{\lambda_p^2} \left(\left(\frac{\lambda}{\lambda_f} \right)^2 - \left(\frac{\lambda}{\lambda_f} \right)^4 + \left(\frac{\lambda}{\lambda_f} \right)^6 \right) = \\ &= \varepsilon_{\infty} - \frac{\lambda^2}{\lambda_p^2} + \frac{\lambda^4}{\lambda_p^2 \lambda_f^2} - \frac{\lambda^6}{\lambda_p^2 \lambda_f^4} \end{aligned} \quad (3)$$

ifoda kelib chiqadi.

Ikkinchi tomondan, eksperiment natijalari asosida “Eng kichik kvadratlar” usulidan foydalanib har qanday ikkita fizik kattaliklar orasidagi bog‘lanishlarni aniqlash mumkin.

$\operatorname{Re} \varepsilon$ va λ lar orasidagi eksperiment natijalarini⁴

$$\operatorname{Re} \varepsilon = A_0 + A_1 \lambda^2 + A_2 \lambda^4 + A_3 \lambda^6 \quad (4)$$

ko‘rinishda faraz qilib, “Eng kichik kvadratlar” usuli yordamida A_i larni aniqlasak hamda (3) va (4) ifodalarni taqqoslak, plazmon parametrlar

$$\varepsilon_{\infty} = A_0, \quad (5)$$

$$\lambda_p = 1/\sqrt{-A_1}, \quad (6)$$

$$\lambda_f = 1/\lambda_p \sqrt{A_2} \quad (7)$$

ga teng ekanligi kelib chiqadi.

Dielektrik singdiruvchanlikning tushayotgan elektromagnit to‘lqinlar to‘lqin uzunligiga bog‘liqligini tadqiq qilish uchun Visual Basicda dastur tuzildi. Mazkur dastur yordamida olingan natijalar MS Excel ga jo‘natilib, grafiklar yordamida tasvirlanadi, eksperimental natijalar bilan taqqoslanadi hamda metall nanozarralar kiritilgan kremniy asosidagi fotoelektrik o‘zgartirgichlarning asosiy parametrlarini hisoblashda qo‘llaniladi.

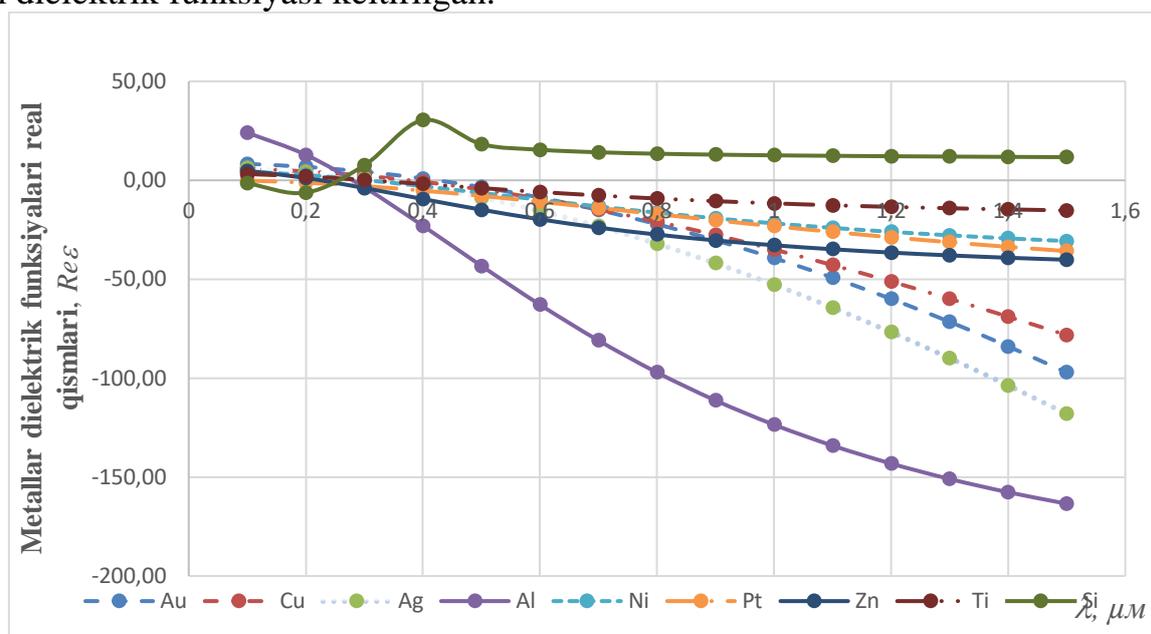
Misol sifatida, dastur yordamida eksperiment natijalari asosida oltin (**Au**), kumush (**Ag**) va mis (**Cu**) kabi metallarning plazmon koeffitsientlari aniqlandi. Hisob-kitob natijalari 1-jadvalda keltirilgan. Olingan natijalar² ishda keltirilgan natijalar bilan deyarli mos keladi. Jadvalda, shuningdek, hisoblash natijalarining aniqligini ko‘rsatuvchi - χ^2 ning qiymatlari ham keltirilgan.

⁴James W. Fleming, Marvin J. Weber et al. Handbook of Optical Materials 4th ed. Boca Raton, 2018, pages 536, eBook ISBN 9781315219615, DOI <https://doi.org/10.1201/9781315219615>

1-jadval. Metallarning plazmon va elektrofizik parametrlari

Element	$\lambda_p, \mu\text{m}$	$\lambda_{fs}, \mu\text{m}$	λ_∞	χ^2	A, eV	m^*, eV	n, sm^{-3}	σ, Sm	τ, s
Ag	0,126	4,056	6,781	0,24	4,52	1	7,0E+12	4,3E+06	2,15E-15
Al	0,05	0,775	28,047	1,05	4,41	0,97	4,3E+13	5,2E+06	4,11E-16
Au	0,143	7,492	8,763	0,20	5,1	0,99	5,4E+12	6,1E+06	3,98E-15
Cu	0,149	3,412	6,296	0,33	4,53	1	5,0E+12	2,6E+06	1,81E-15
Ni	0,13	0,908	4,95	0,04	5,04	1	6,6E+12	9,0E+05	4,82E-16
Pt	0,164	1,298	0,248	0,02	5,12	1	4,2E+12	8,1E+05	6,89E-16
Ti	0,149	0,718	3,606	0,09	4,33	3,95	1,9E+13	5,4E+05	3,81E-16
Zn	0,086	0,631	6,145	0,57	4,2	0,85	1,3E+13	1,4E+06	3,35E-16

1-rasmda va 2-jadvalda “Eng kichik kvadratlar” usuli yordamida aniqlangan plazmon parametrlar asosida (**Au**), kumush (**Ag**) va mis (**Cu**) kabi metallar dielektrik funksiyalari real qismining tushayotgan yorug‘likning to‘lqin uzunligiga bog‘liqlik grafiklari va hisoblash natijalari keltirilgan. Rasmda shuningdek, kremniy (**Si**) ning ham dielektrik funksiyasi keltirilgan.



1-rasm. Metallar dielektrik funksiyalari real qismlarining tushayotgan yorug‘likning to‘lqin uzunligiga bog‘liqligi, $Re \epsilon = f(\lambda)$.

2-jadvalda (1) shartlar bajariladigan, ya’ni plazmonlar uyg‘onishi mumkin bo‘lgan qiymatlar ajratib (qizil rangda) ko‘rsatilgan. Natijalardan ko‘rinib turibdiki, tushayotgan yorug‘likning to‘lqin uzunligi **Ag** da $\lambda=0.2 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.6 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Al** da $\lambda=0.3 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.5 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Au** da $\lambda=0.3 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.7 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Cu** da $\lambda=0.2 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.7 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Ni** da $\lambda=0.2 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.8 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Pt** da $\lambda=0.3 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.7 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Ti** da $\lambda=0.2 \mu\text{m}$ va $\lambda>1.1 \mu\text{m}$ bo‘lganda, **Zn** da $\lambda=0.2 \mu\text{m}$, $\lambda=0.2 \mu\text{m}$ va $\lambda>0.6 \mu\text{m}$ bo‘lganda plazmonlar uyg‘onishi mumkin.

2-jadval. Metallar dielektrik funksiyalari real qismlarining tushayotgan yorug‘likning to‘lqin uzunligiga bog‘liqligi, $Re \varepsilon = f(\lambda)$.

$\lambda, \mu m$	<i>Ag</i>	<i>Al</i>	<i>Au</i>	<i>Cu</i>	<i>Ni</i>	<i>Pt</i>	<i>Ti</i>	<i>Zn</i>
0,1	6,15	24,07	8,27	5,85	4,37	-0,12	3,17	4,81
0,2	4,26	12,90	6,80	4,51	2,69	-1,21	1,94	1,18
0,3	1,13	-3,57	4,36	2,29	0,15	-2,95	0,17	-3,89
0,4	-3,21	-22,99	0,95	-0,78	-2,97	-5,22	-1,87	-9,46
0,5	-8,75	-43,26	-3,42	-4,68	-6,39	-7,89	-3,95	-14,86
0,6	-15,44	-62,88	-8,75	-9,36	-9,87	-10,85	-5,91	-19,72
0,7	-23,23	-80,96	-15,02	-14,79	-13,22	-13,95	-7,67	-23,90
0,8	-32,08	-97,12	-22,21	-20,91	-16,35	-17,10	-9,21	-27,44
0,9	-41,92	-111,27	-30,32	-27,66	-19,21	-20,21	-10,53	-30,38
1	-52,7	-123,54	-39,33	-35,00	-21,76	-23,22	-11,66	-32,82
1,1	-64,3	-134,09	-49,22	-42,85	-24,04	-26,09	-12,62	-34,85
1,2	-76,7	-143,17	-59,96	-51,17	-26,04	-28,79	-13,43	-36,54
1,3	-89,9	-150,96	-71,55	-59,88	-27,81	-31,30	-14,12	-37,95
1,4	-103,7	-157,67	-83,95	-68,93	-29,35	-33,63	-14,71	-39,14
1,5	-118,1	-163,46	-97,13	-78,26	-30,71	-35,78	-15,21	-40,15

Plazmonik parametrlar shuningdek, metallarning elektrofizik parametrlarini hisoblashga imkon beradi. Jumladan,

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m^*} \quad (8)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (9)$$

ifodalardan zaryad tashuvchilar konsentratsiyasini aniqlash mumkin:

$$n = \frac{m^* \pi c^2}{e^2 \lambda_p^2} \quad (10)$$

Zaryad tashuvchilarning relaksatsiya vaqti

$$\tau = \frac{\lambda_f}{2\pi c} \quad (11)$$

formula orqali aniqlanadi. Uni

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \quad (12)$$

elektr o‘tkazuvchanlik formulasiga qo‘ysak,

$$\sigma_0 = \frac{c\lambda_f}{2\lambda_p^2} \quad (13)$$

elektr o'tkazuvchanlikning plazmon parametrlariga bog'liq yangi ifoda kelib chiqadi.

1-jadvalda metallarning (10), (11) va (13) formulalar bo'yicha hisoblangan asosiy elektrofizik parameterlari ham keltirilgan.

“Yarimo‘tkazgichga kiritilgan nanozarralar uchun Shredinger tenglamasi” deb nomlangan uchinchi bobda to‘gri burchakli, parabolik va uchburchak ko‘rinishlardagi potentsiallarda nanozarradagi elektron harakatini tavsiflash uchun Shredinger tenglamalari shakllantirilgan va yechimlari keltirilgan. G‘alayonlanish nazariyasidan foydalanib, elektronning yorug‘likni yutib, nanozarradan chiqishini tavsiflovchi Shredinger tenglamasini yechish usullari keltirilgan. Shuningdek, ixtiyoriy shakldagi potentsiallar uchun Shredinger tenglamasini sonli yechish usullari tavsiflangan. Misol sifatida, to‘gri burchakli, parabolik va uchburchak ko‘rinishlardagi potentsiallar uchun Shredinger tenglamasi yechilib, MS Excel ko‘rinishidagi natijalar keltirilgan.

“Kremniyga kiritilgan nanozarralardan fotoemissiya kesimi” deb nomlangan to‘rtinchi bobda metall-yarimo‘tkazgich bo‘linish chegarasida elektromagnit maydon, elektronning effektiv massasi va potentsialning o‘zgarishi hisobga olinganda fotoemissiya ehtimolligi amplitudasi va kesimi uchun ifodalar olingan. Olingan ifodalar nanozarralardan kremniyga fotoemissiya uchun tadbiiq qilingan.

Nanozarrachalarda LPR qo‘zg‘alishida zaryad tashuvchilarning uzatilishi bilan bog‘liq hodisalardan biri bu nanozarrachalardan fotoemissiya. Nanozarrachalardan fotoemissiya katta (yorug‘lik to‘lqin uzunligi bilan solishtirganda), "makroskopik" metall strukturalardan fotoemissiyaning sezilarli darajada farq qiladi, chunki, birinchidan, LPR qo‘zg‘alganda EM maydon zarracha ichida va uning tashqarisida, nanozarracha yuzasiga yaqin sohalarda kuchli ortadi; ikkinchidan, nanozarracha sirtining uning hajmiga nisbati makroskopik tuzilmalarga qaraganda ancha katta. Ikkinchisi sabab muhim ahamiyatga ega, chunki fotoemissiyaga asosiy hissa qo‘shuvchi sirtiy fotoeffekt elektron fotonni yutib, metallni tark etganda va sirt bilan to‘qnashganda yuzaga keladi.

Nanozarrachalardan fotoemissiya miqdorini aniqlash va nanozarrachalardan fotoemissiya maksimal bo‘lgan optimal parametrlarni aniqlash uchun nanozarrachalardan fotoemissiya kesimini hisoblash kerak bo‘ladi. Metall zarrachalardan sirt fotoemissiyasining kesimini ulardagi LPR qo‘zg‘alishini hisobga olgan holda hisoblash va ushbu hisob-kitoblarga asoslanib, nanozarrachalardan fotoemissiya uzluksiz metall qatlamdan ko‘ra sezilarli darajada samaraliroq bo‘lishi ko‘rsatish bu ishning asosiy maqsadidir.

Ushbu bobda A.M.Brodskiy va Yu.Ya.Gurevichlar monografiyasida tavsiflangan klassik nazariyaga asosan nanozarrachalarning fotoemissiya kesimi hisoblab chiqiladi. Ushbu nazariyaning natijasini fotoemissiya ehtimoli uchun sirt effektlari, ya‘ni zarrachalar sirtida elektr maydoni va elektron massasining o‘zgarishlarini hisobga olgan holda umumlashtiriladi. Muhim yangi natija shundan iboratki, yuqorida qayd

etilgan sirt effektlarini hisobga olgan holda fotoemissiya kesimi bir necha marta o'zgaradi. Sirt effektlarini hisobga olish, ayniqsa, uzluksiz metall qatlamiga nisbatan nisbatan katta sirt yuzasiga ega bo'lgan nanozarrachalardan fotoemissiya uchun muhimdir.

G'alayon nazariyasi asosida bo'linish chegarasiga tik yo'nalishda harakatlanayotgan fotoemission elektronning ehtimollik amplitudasi uchun

$$C_+(\infty) = \frac{|e|m}{\hbar\omega W_1} \int_{-\infty}^{\infty} dz (E_m \frac{d\Psi_0}{dz} \Psi_{1-} + \frac{1}{2} \Psi_{1-} \Psi_0 \frac{dE_m}{dz}) \quad (14)$$

ifoda olingan. Umumiy holda fotoemissiya ehtimolligi amplitudasi

$$C_+(\infty) = \frac{|e|m}{W_1(\hbar\omega)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz (C_V + C_E + C_m) / m \quad (15)$$

ko'rinishda bo'ladi, bu yerda C_V , C_E , C_m – potensial, elektromagnit maydon va elektron massasining bo'linish chegarasida o'zgarishini hisobga olingan holdagi fotoemissiyaning tavsivlaydi:

$$C_V = -EV' \Psi_0 \Psi_{1-}, \quad (16)$$

$$C_E = E' \{ (\hbar^2 / 2m) \Psi_0' \Psi_{1-}' + [E_0 - V + \hbar\omega / 2] \Psi_0 \Psi_{1-} \}, \quad (17)$$

$$C_m = Em' / m [E_0 - V + \hbar\omega / 2] \Psi_0 \Psi_{1-} \quad (18)$$

Metall nanozarrachalarning fotoemissiya kesimi va fototok

$$\sigma_{ph-em} = \frac{8\pi\hbar\omega}{cn_+} C_{em} |F|^2 K_{geom}, \quad (19)$$

$$J_{ph-em} = C_{em} |F|^2 K_{geom} |E|^2 \quad (20)$$

ifodalar orqali aniqlanadi, bu yerda $n_+ = \text{Re} \sqrt{\varepsilon_+}$,

$C_{em} = \frac{e^2 k T V^2}{\pi^2 \hbar^5 \omega^4} \int dx [1 + (\hbar\omega / V - 1) / x]^{1/2} \ln(1 + \exp(\frac{E_f - Vx}{kT})) U(x) |K_{dis}(x)|^2 -$ fotoemissiya ehtimolligi;

$$U(x) = \frac{4r_m^2}{(r_m + 1)^2} \frac{x}{[x + r_m(1-x)] \{ (x + \hbar\omega / V)^{1/2} + [r_m(x + \hbar\omega / V - 1)]^{1/2} \}^2},$$

$$K_{dis}(x) = \frac{1}{2} (1 + \varepsilon_- / \varepsilon_+) [1 + \frac{1-r_m}{1+r_m} (2x + \hbar\omega / V - 1)] + \frac{1}{2} (1 - \varepsilon_- / \varepsilon_+) [x + \hbar\omega / V]^{1/2} + i(1-x)^{1/2}]^2$$

$$F = \frac{1}{1 + R_{dep} - iR_{rad}} \frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + (\varepsilon_- - \varepsilon_+)L} -$$

- chegarada elektr maydonining o'zgarishini hisobga oluvchi funksiyalar,

$$R_{dep} = \frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + (\varepsilon_- - \varepsilon_+)L} (A\varepsilon_+ y^2 + B\varepsilon_+^2 y^4), \quad R_{rad} = \frac{16}{9r} \left(\frac{\pi m_+ a}{\lambda} \right)^3 \frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + (\varepsilon_- - \varepsilon_+)L},$$

$$L = \frac{r^2}{2} \int \frac{du}{(u + r^2)^2 (u + 1)^{1/2}} -$$

- depolyarizatsiya va radiatsion yo‘qotishlarni hisobga oluvchi funksiyalar,

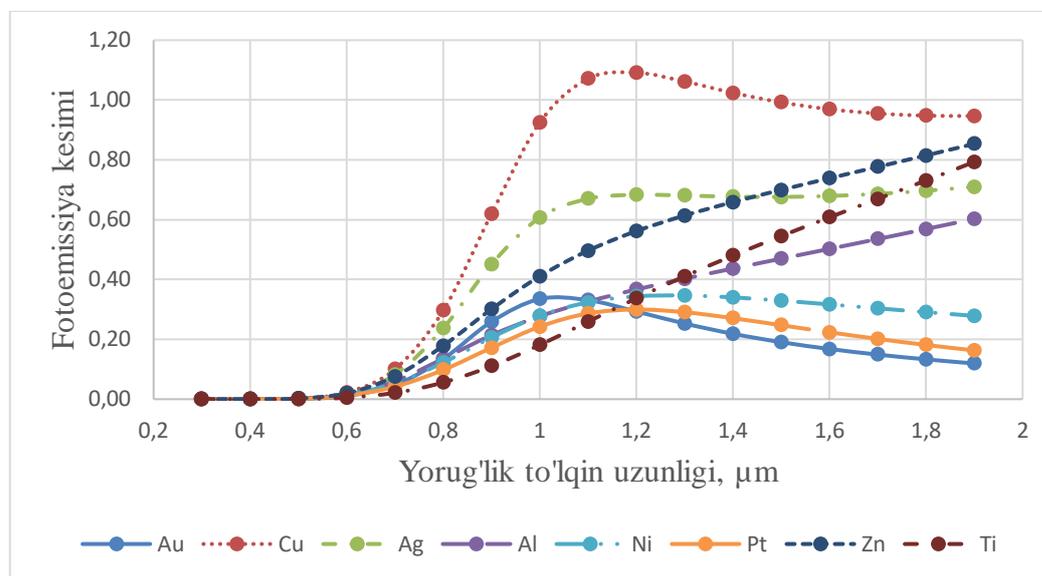
$$\varepsilon_-(\lambda) = \varepsilon_m(\lambda) + (\lambda/\lambda_p)^2 \left[\frac{1}{1+i\lambda/\lambda_f} - \frac{1}{1+(i\lambda/\lambda_f)(a_c/a+1)} \right], \quad \varepsilon_m(\lambda) = \varepsilon_\infty + (\lambda/\lambda_p)^2 \frac{1}{1+i\lambda/\lambda_f},$$

$$\varepsilon_+(\lambda) = \varepsilon_\infty + \sum_{i=1}^3 \frac{C_i}{1 - \left(\frac{1.242}{\lambda E_i}\right)^2 - i \frac{1.242}{\lambda E_i} \gamma_i} - F_1 \chi_1^{-2}(\lambda) \ln[1 - \chi_1^2(\lambda)] - F_2 \chi_2^{-2}(\lambda) \ln \frac{1 - \chi_1^2(\lambda)}{1 - \chi_2^2(\lambda)}$$

- nanometallar va kremniyning dielektrik funksiyalari.

Yuqoridagi ifodalar asosida metallarning plazmon parametrlarini, shuningdek, to‘lqin uzunligiga bog‘liq metall nanozarrachalardan fotoemissiya kesimi, fotoemission tok va elektr maydon intensivligini hisoblash uchun Visual Basicda dastur tuzildi. Dastur chiqish ishi, Fermi energiyasi, elektronning effektiv massasi, plazmonik parametrlar, nanozarracha o‘lchamlari va boshqalarni kiritish va o‘zgartirish imkonini beradi. Dasturning afzalligi shundan iboratki, yagona dasturiy muhitda hisob-kitoblar natijalari MS Excelga eksport qilinadi va ular nafaqat jadval, balki grafik shaklda ham ifodalanadi.

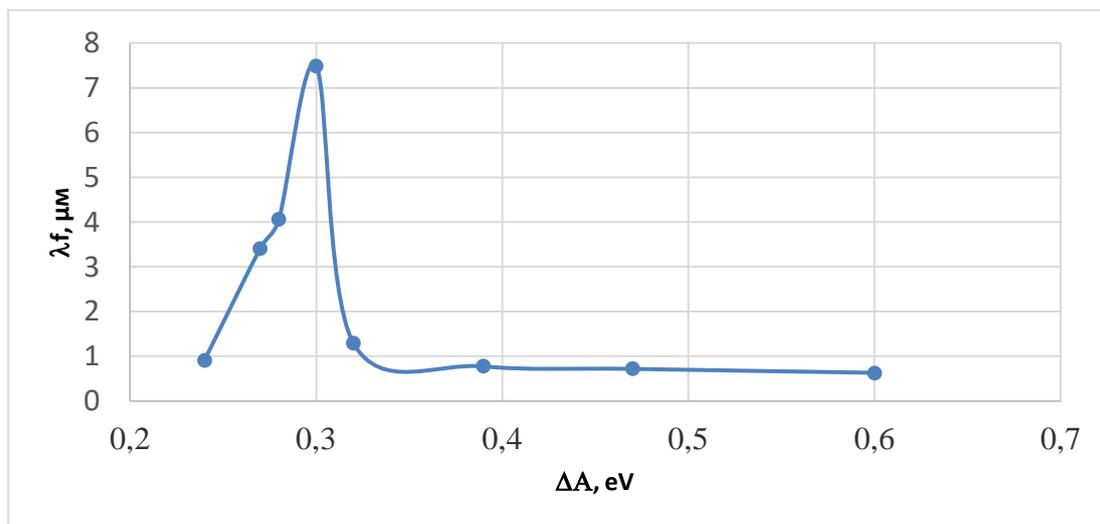
Hisoblash natijalari rasmlarda grafiklar shaklida ko‘rsatilgan. Kremniydagi a=10 nm o‘lchamli metall nanozarrachalarning (2-rasm) fotoelektron emissiya kesimining (σ) spektral bog‘liqligini hisoblash natijalariga ko‘ra, nafaqat qimmatbaho oltin, balki kumush va misning ham nanozarracha material sifatida foydalanish mumkin. Bundan tashqari, mis nanozarralari fotoelektron emissiya kesimining eng yuqori qiymatlariga ega.



2-rasm. Kremniydagi a=10 nm o‘lchamli metall nanozarrachalarning fotoelektron emissiya kesimining (σ) spektral bog‘liqligi.

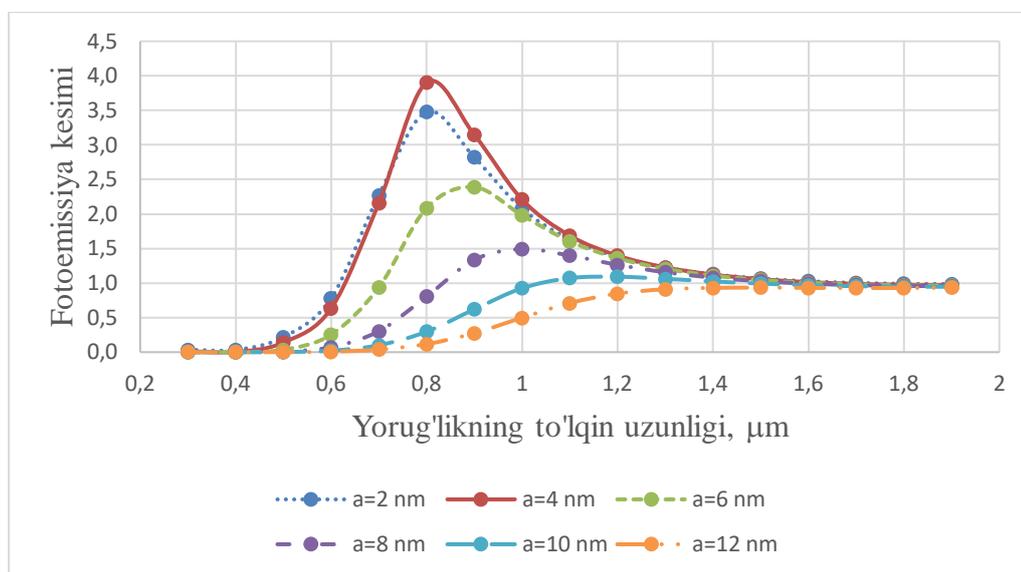
3-rasmda metallar plazmon parametrlarining (λ_f) elektronning metallardan va kremiydan chiqish ishlari farqiga bog‘liqligi keltirilgan. Rasmdan ko‘rinib turibdiki, oltin, kumush va misda bu kattalik eng katta qiymatlarga erishadi. Shuning uchun ham

2-rasmda keltirilgan fotoemissiya kesimi bu metallar uchun eng katta qiymatlarga erishadi.



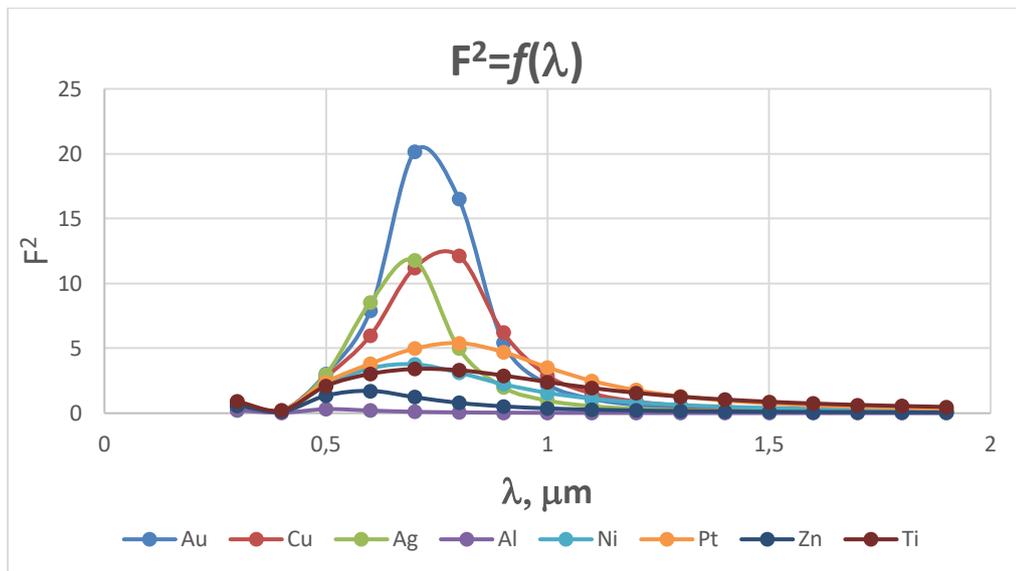
3-rasm. Metallar plazmon parametrlarining (λ_f) elektronning metaldan va kremiydan chiqish ishlari farqiga bog'liqligi

4-rasmda kremniydagi metall (Cu) nanozarrachalarining fotoelektron emissiya kesimining (σ) ularning o'lchamiga qarab spektral bog'liqligini hisoblash natijalari ko'rsatilgan. Rasmdan ko'rinib turibdiki, fotoelektron emissiya kesimining eng yuqori qiymati nanozarracha o'lchami $a=4$ nm da erishiladi. Mis nanozarracha o'lchami oshgani sari fotoelektron emissiya kesimi kamayadi va egri chiziqning maksimal nuqtasi o'ngga suriladi.



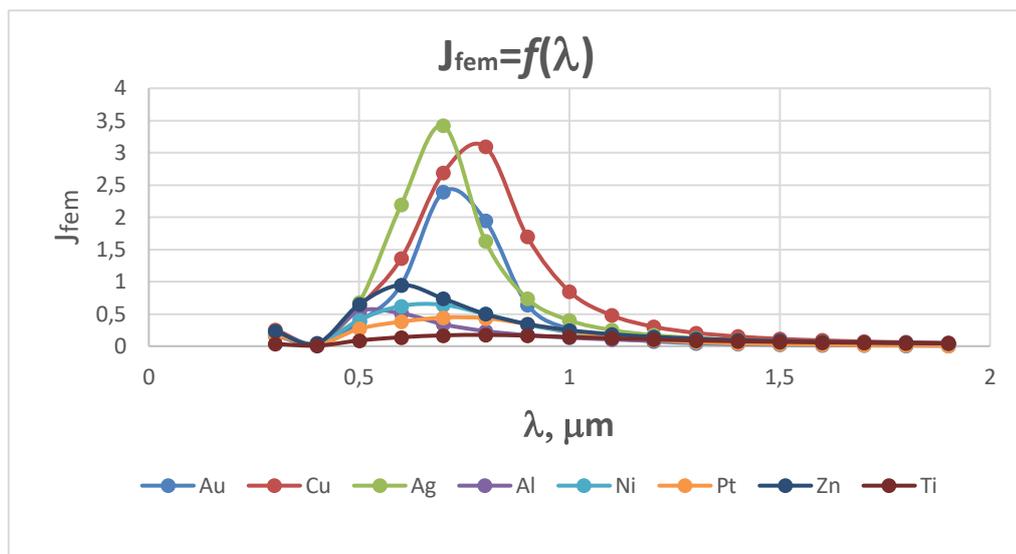
4-rasm. Kremniydagi metall (Cu) nanozarrachalarning fotoelektron emissiya kesimining (σ) nanozarracha o'lchamiga bog'liq spektral taqsimoti.

5-rasmda kremniydagi metall nanozarrachalarning fotoelektron emissiyasi (F^2) elektr maydoni intensivligining spektral bog'liqligini hisoblash natijalari ko'rsatilgan. Rasmdan ko'rinib turibdiki, oltin uchun eng yuqori intensivlik qiymatiga erishiladi.



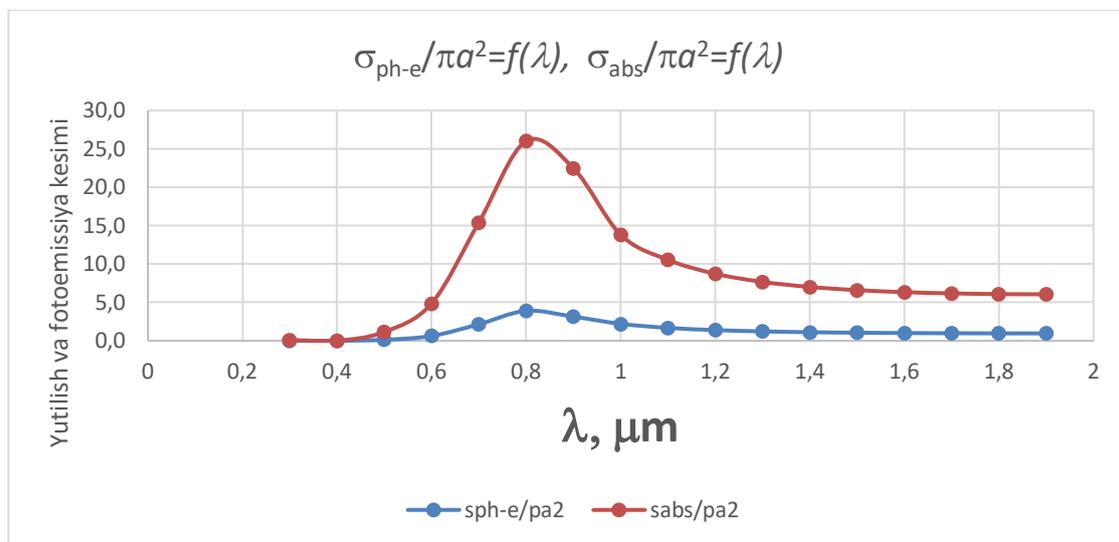
5-rasm. Kremniydagi metall nanozarrachalarning fotoelektron emissiyasi (F^2) elektr maydonining intensivligi ortishining spektral bog‘liqligi.

6-rasmda kremniydagi metall nanozarrachalarning fotoemission tokning (J_{fem}) spektral bog‘liqligini hisoblash natijalari ko‘rsatilgan. Rasmdan ko‘rinib turibdiki, fotoemission tokning eng yuqori qiymati kumush va mis uchun to‘g‘ri keladi.



6-rasm. Kremniyda metall nanozarrachalarning fotoemission tokning (J_{fem}) spektral bog‘liqligi.

7-rasmda kremniydagi $a=4$ nm radiusli metall (Cu) nanozarrachalarining fotoelektron emissiya va yutilish kesimlarining (σ) spektral bog‘liqligini hisoblash natijalari ko‘rsatilgan. Rasmdan ko‘rinib turibdiki, maksimal nuqtada fotoelektron emissiya kesimi yutilish kesimining $\sim 0,15$ qismini, ya’ni 15% ini tashkil qilmoqda. Demak yutilayotgan fotonlarning $\sim 15\%$ fotoelektronlarga aylanadi.



7-rasm. Kremniydagi $a=4$ nm radiusli metall (Cu) nanozarrachalarining fotoelektron emissiya va yutilish kesimlarining (σ) spektral bog‘liqligi.

Shunday qilib, tadqiqotning eng muhim natijalari quyidagilardir:

- Visual Basucda metallarning plazmon parametrlarini, shuningdek, tushayotgan yorug‘lik to‘lqin uzunligiga qarab fotoemissiya kesimi, nanozarracha ichidagi elektr maydoni intensivligi va fotoemission toklarni hisoblash dasturi ishlab chiqildi. Dastur chiqish ishi, Fermi energiyasi, elektronning effektiv massasi, plazmon parametrlari, nanozarrachalar o‘lchamlari va boshqalar qiymatlarini kiritish va o‘zgartirish imkonini beradi. Yagona dasturiy ta‘minot muhitida hisob-kitoblar natijalari MS Excelga eksport qilinadi va nafaqat jadval, balki grafik shaklda ham ifodalanadi;

- nanoplazmonika ta‘sirini yanada samarali amalga oshirishga erishish uchun metall nanozarrachalarining optimal o‘lchamlari aniqlandi;

- Nanzarracha material sifatida nafaqat qimmatbaho oltin va kumush, balki misdan ham foydalanish mumkinligi ko‘rsatildi. Bundan tashqari, mis nanozarralari fotoelektron emissiya kesimi va fotoemission tokning eng yuqori qiymatlariga ega.

XULOSA

Zamonaviy raqamli modellashtirish va nanozarralar kiritilgan kremniyning asosiy fotoelektrik xususiyatlarini chuqur tahlil qilib, har tomonlama o‘rganish natijasida yangi texnik yechimlar taklif qilindi va quyidagi asosiy xulosalar shakllantirildi:

1. “Eng kichik kvadratlar usuli” asosida metall nanozarrachalar dielektrik funksiyalarining ularga tushayotgan yorug‘likning to‘lqin uzunligiga bog‘liqligi uchun qator ko‘rinishidagi yangi ifoda va plazmonik parametrlarni aniqlashning yangi usuli taklif qilindi. Bu ifoda plazmonlarning uyg‘onish shartlarini aniqlashga imkon beradi.

2. Aniqlangan plazmonik parametrlar asosida metall nanozarrachalarning zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi, relaksatsiya vaqti, elektr o‘tkazuvchanligi kabi asosiy elektrofizik parametrlarini hisoblash uchun yangi ifodalar taklif qilindi.

3. Metall nanozarrachalarda harakatlanayotgan va yorug‘lik ta‘sirida kremniyga chiqishi mumkin bo‘lgan elektronlar uchun ixtiyoriy ko‘rinishdagi potensialga mos Shredinger tenglamasining sonli yechish usuli taklif qilindi.

4. Metall nanozarrachalarning dielektrik funksiyalari va plazmonik parametrlari asosida kremniyga fotoemissiya yuz berishi uchun eng maqbul metall turlari va ularning o‘lchamlari aniqlandi;

5. Metall nanozarrachalardan kremniyga fotoemissiyada nanozarracha ichidagi elektr maydon intensivligi ~20 martagacha oshishi mumkinligi ko‘rsatildi.

6. Metall nanozarrachalardan (mis) kremniyga fotoemissiyada hosil bo‘ladigan fotoemission tokning maksimal qiymati ~3.5 mA/sm² ga teng bo‘ldi.

7. Kremniydagi $a=4$ nm radiusli metall (Cu) nanozarrachalarining fotoelektron emissiya va yutilish kesimlarining (σ) spektral bog‘liqligini o‘rganish natijasida yutilayotgan fotonlarning ~15% fotoelektronlarga aylanishi aniqlandi.

8. “*Visual Basic*” dasturiy vositalar yordamida metall nanozarrachalar kiritilgan kremniyning asosiy fotoelektrik xossalarini kompleks tadqiq qilish imkonini beruvchi EHM dasturiy mahsulotlar ishlab chiqildi va rasman yangi dasturiy mahsulotlar sifatida davlat ro‘yxatidan o‘tkazildi (“Shredinger tenglamasi” Guvohnoma № DGU 20866, 2022 yil, “Nanoplazmonika uchun metallarning dielektrik funksiyalari” Guvohnoma № DGU 17752, 2022 yil, “Metall nanozarralardan fotoemissiya kesimi” Guvohnoma № DGU 17966, 2022yil).

9. Kvant o‘lchamli effektlardan samarali foydalanishga imkon beradigan yangi konstruksiyali fotoelektrik o‘zgartirgichlar tayyorlash uchun teksturalangan kremniy sirtlarida tekis taqsimlangan metall nanozarrachalarni hosil qilishning yangi usuli taklif qilindi va unga O‘zbekiston Respublikasi patenti olindi (Patent O‘zR № IAP 06512, 18.05.2021 yil).

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.11.2022.FM/Т.66.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ НАМАНГАНСКОМ
ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ**

АНДИЖАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЮЛДАШЕВА НАЗОКАТХОН МУРОД КИЗИ

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ НА СВОЙСТВА
КРЕМНИЯ**

01.04.10 – физика полупроводников

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)
ПО ФИЗИКО – МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Наманган – 2023

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан за № B2022.4.PhD/FM823.

Диссертация выполнена в Наманганском инженерно – технологическом институте.

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

Научный руководитель: **Зайнабидинов Сирожиддин**
доктор физико – математических наук,
академик АН РУз.

Официальные оппоненты: **Гулямов Гафур**
доктор физико – математических наук, профессор

Насиров Абдуманап Абдулмажидович
кандидат физико – математических наук, доцент

Ведущая организация: **Ферганский государственный университет**

Защита диссертации состоится « ____ » _____ 2023 года в ____ часов на заседании Научного совета PhD.03/30.11.2022.FM/T.66.04 при Наманганском инженерно – технологическом институте по адресу: 160115, г. Наманган, ул. Касансайская -7, Административное здание Наманганского инженерно – технологического института, 1-этаж, малый зал совещаний, Тел./факс: (99869) 225-10-07; (99869) 225-76-75, e-mail: niei_info@edu.uz.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Наманганского инженерно – технологического института (зарегистрирована за № ____) по адресу: 160115, г. Наманган, ул. Касансайская -7, Тел. (99869) 225-10-07.

Автореферат диссертации разослан « ____ » _____ 2023 г.
(протокол рассылки № ____ от « ____ » _____ 2023 г.)

У.И.Эркабаев

Председатель Научного совета по присуждению ученых степеней,
д.ф-м.н., доцент

Б.Х. Кучкоров

Ученый секретарь Научного совета по присуждению ученых степеней,
PhD., доцент

Н.Ю. Шарибаев

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

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. Постоянно растущий спрос на энергоресурсы в мире и обострение глобальных экологических проблем требуют стремительного расширения использования возобновляемых источников энергии. Поэтому проводится ряд научно-практических исследований по повышению эффективности экологически чистых возобновляемых источников энергии - полупроводниковых фотоэлектрических преобразователей энергии. Увеличение поглощения светового потока, падающего на поверхность фотоэлектрических преобразователей энергии, получение новые перспективные моно- и поликристаллические структуры для высокоэффективных фотоэлектрических устройств, изучение их электрофизические и фотоэлектрические свойства, а также выяснение уникальные возможности использования источников энергии является одной из актуальных проблем современности.

В современном мире большое значение придается коренному улучшению свойств кремния, использованию новейших достижений науки и техники для улучшения свойств современных микроэлектронных устройств и фотоэлектрических приборов, обеспечения их быстродействия и высокой эффективности. В связи с этим предпринимаются усилия по проведению целевых научных исследований, в том числе по развитию функциональных возможностей существующих устройств микроэлектроники в соответствии с современными потребностями потребителей. Для этого радикальное изменение свойства исходных базовых материалов, кардинальное улучшение оптические свойства, чувствительность и быстродействие кремния, расширение энергетический спектр поглощаемых в его объеме фотонов, повышение эффективность фотоэлектрических устройств, созданных на основе кремния, исследования, проводимые путем внедрения в поверхность кремния наноразмерных частиц металла, определение физических механизмов оптического поглощения наночастиц в объеме кремния, миграции несбалансированных носителей заряда и генерации -процессы рекомбинации являются актуальными задачами.

В нашей республике уделяется особое внимание развитию науки, в том числе исследованиям влияния наночастиц металлов на свойства полупроводниковых материалов, и достигаются определенные результаты. В стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы предусмотрен ряд задач, в том числе были определены «непрерывное обеспечение экономики электроэнергией и активное внедрение технологий «Зеленой экономики» во все отрасли, повышение энергоэффективности экономики в 20 % ¹. Реализация этих задач, в том числе оптического поглощения наночастиц металлов в кремнии, являющемся основой различных полупроводниковых приборов и солнечных

¹ Указ Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № ПФ-60 «О новой стратегии развития Республики Узбекистан на 2022-2026 годы»

элементов, генерации и рекомбинации несбалансированных носителей заряда, путем теоретических расчетов, основанных на численном моделировании физических механизмов процессов переноса заряда в исследовании поля р-п-перехода является одной из актуальных задач, имеющих важное практическое значение.

Данное исследование в определенной мере служит реализации выполнения задач, определенных в Постановлении Президента Республики Узбекистан № ПФ-60 от 28 января 2022 года «О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы», № PQ-4779 от 10 июля 2020 года «Энергоэффективность экономики на дополнительные меры по снижению зависимости отраслей экономики от топливно-энергетических продуктов за счет увеличения и привлечения имеющихся ресурсов»², PQ-5063 от 9 апреля 2021 года «О продвижении возобновляемой и водородной энергетики в Республике Узбекистан о мерах по развитию», от 17 июля 2018 г. № ПЗ-3855 «О дополнительных мерах по повышению эффективности коммерциализации результатов научной и научно-технической деятельности»³, 2018 ПЗ-3899 от 6 августа «О мерах по повышению эффективности системы интеграции научной и инновационной деятельности», PQ-5032 от 19 марта 2021 г. «Меры по повышению качества образования в области физики и развитию научных исследований» и иных нормативно-правовых документах, связанных с данной деятельностью.

Соответствие исследований приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Диссертационная работа соответствует приоритетным направлениям развития науки и техники Республики Узбекистан, в частности «III. Развитие возобновляемых источников энергии» - в рамках государственной программы прикладных исследований: ППИ-3, «Развитие энергетики, энерго- и ресурсосбережения, транспорта, станкостроения, современной электроники, микроэлектроники, электронного приборостроения».

Степень изученности проблемы. Поскольку кремний считается важнейшим сырьем для преобразования световой энергии в электрическую, научные исследования по изучению и управлению физическими процессами в полупроводниках с большим интересом изучаются учеными ведущих мировых научных центров и университетов. В частности, А.Л.Эфрос, Ж.И.Алферов, А.М.Бродский, Ю.Я.Гуревич, В.В.Климов, С.Л.Майер, Э.Л.Нолле, И.В.Проценко, Т.А.Вартанян, М.Л.Бронгерсма, К.Р.Кэтчпол, В.А.Миличко и ряд других исследователей ведут научные исследования по разработке полупроводниковых наноструктур и интегральных фотоэлектрических преобразователей на основе кремния, внедренные наночастицы. Представители научной школы Республики Узбекистан академик Р.А.Муминова,

² Указ Президента Республики Узбекистан от 10.07.2020 №УП-4779

³ Постановление Президента Республики Узбекистан от 14.07.2018 №ПП-3855

М.С.Баходирханова, С.Зайнобидинова, А.С.Саидова, профессоры Р.Я.Расулова, К.П.Абдурахмонова, Э.З.Имамова, Г.Гулямова, К.Исмаилова, Р.Алиева и др. широко изучено влияние многих наночастиц, таких как Ni, Rh, Mn, Cu, Pt, Au, Ag, Ti, на электрофизические, рекомбинационные, фотоэлектрические и другие свойства кремния и основные фотоэлектрические параметры солнечных элементов на основе кремния. И.В.Проценко и его ученики нашли и широко использовали уникальные решения по созданию микро- и наноструктур на поверхности металлических фотоприемников для повышения эффективности фотоэмиссии, В.В.Климов и С.Л.Майер предложили использовать плазмонные свойства наночастиц для повышения эффективности фотоприемников, экспериментально наблюдали увеличение эффективности фотоэмиссии при возбуждении ЛПП от металлических наночастиц и предложили использовать их для увеличения эффективности фотодетекторов. Однако систематического теоретического анализа фотоэмиссии наночастиц и определения ее сечения в этих работах не проводилось. Также не проводились достаточно научные исследования, проведенные с учетом размеров и типа различных наночастиц, входящих в состав фотопреобразователей на основе кремния, зависимости диэлектрических функций металлов от длины волны падающего света с учетом области введения наночастиц.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационная работа соответствует научному плану кафедры физики Андиганского государственного университета «Получение многослойных и поликристаллических полупроводников для инжекционных устройств и солнечных элементов и изучение их электрофизических свойств», «Теоретические и практические исследования электрофизические свойства твердых тел в результате различных воздействий и внешних воздействий, проектам А-4-12 «Эффект наноплазмоники и повышение эффективности получения фотоэлектрической энергии в кремниевых р-п-структурах» (2015-2017 гг., научный руководитель проф. Р.Алиев) и ОТ-Ф2-68 «Механизмы образования микро- и нанокомпозитов с примес-дефектами в кристаллах и их роль в создании многослойных структур с широкими возможностями» (2017-2021 гг., научный руководитель акад. С.Зайнобидинов).

Целью исследования является определение оптимальные условия введения металлических наночастиц для улучшения оптических и электрофизических свойств кремния, опираясь на законы классической и квантовой физики.

Задачи исследования: Определение зависимость диэлектрических функций металлических наночастиц, внедренных в кремний, от длины волны падающего на них света, их плазмонных параметров и условий пробуждения плазмонов для повышения эффективности фотоэлектрических преобразователей;

разработка математической модели определения оптимального типа металла и размера наночастиц для фотоэмиссии из наночастиц металла в кремний;

вывод выражений зависимости сечения фотоэмиссии с металлических наночастиц на кремний и напряженности электрического поля внутри наночастицы от длины волны падающего света;

разработка программ, позволяющих комплексно исследовать основные фотоэлектрические свойства кремния, содержащих металлические наночастицы с помощью программных средств «Visual Basic».

Объектом исследования является смоделированный на основе цифровых технологий кремний, содержащий наночастицы.

Предметом исследования является электрофизические и оптические свойства монокристаллического кремния, смоделированного на основе цифровых технологий с различными металлическими наночастицами.

Методы исследований. Для решения поставленной в процессе исследования задачи использовались методы цифрового моделирования метод «наименьших квадратов», система программирования «Visual Basic» и официально зарегистрированные программные продукты «Уравнение Шредингера» (№ ДГУ 20866, 2022 г.), «Диэлектрические функции металлов для наноплазмоники» (№ ДГУ 17752, 2022 г.), «Сечение фотоэмиссии из металлических наночастиц» (№ ДГУ 17966, 2022 г.).

Использовались методы численного моделирования на основе метода «наименьших квадратов», математического аппарата квантовой механики, официально зарегистрированных программных продуктов ЭВМ с использованием системы программирования «Visual Basic».

Научная новизна исследования заключается в следующем:

получены новые выражения, рассчитывающие диэлектрические функции металлических наночастиц в зависимости от длины волны падающего на них света и их основные электрофизические параметры, такие как концентрация носителей заряда, время релаксации, электропроводность в зависимости от плазменных параметров;

показана зависимость сечения фотоэмиссии с металлических наночастиц на кремний от типа и размера металлических наночастиц и определено, что наиболее подходящим типом металла является медь и ее размер должен быть ~4 нм;

определено, что при фотоэмиссии из наночастиц металла в кремний напряженность электрического поля внутри наночастицы возрастает до 20 раз, причем эта величина является наибольшей для наночастицы золота, а максимальное значение тока фотоэмиссии больше для золота ~3,5 мА/см²;

в результате сравнения спектральной зависимости сечений фотоэлектронной эмиссии и поглощения (σ) наночастиц металла (Cu) с радиусом $a=4$ нм в кремнии было определено, что ~15% поглощенных фотонов преобразуются в фотоэлектроны.

Практические результаты исследования следующие:

разработан новый метод формирования равномерно распределенных металлических наночастиц на текстурированных поверхностях кремния для получения фотоэлектрических преобразователей с новой структурой, позволяющей эффективно использовать эффекты квантового масштаба;

создана компьютерная программа, позволяющая численно решать уравнение Шрёдингера для произвольного потенциала с целью определения оптимального потенциала для электронов, движущихся в металлических наночастицах и способных выйти в кремний под действием света;

создана компьютерная программа для определения зависимости диэлектрических функций металлических наночастиц от длины волны падающего на них света, их плазмонных и электрофизических параметров, условий возбуждения плазмонов.

Достоверность результатов исследований основана на использовании в исследованиях современных численных методов моделирования, логической целостности выполненных работ, совместимости результатов расчетов с результатами экспериментов, общепринятых стандартных методов обработки результатов измерений.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследований заключается тем, что новые выражения и теоретические выводы для зависимости диэлектрических функций металлических наночастиц от длины волны падающего на них света, их плазмонных и электрофизических параметров, а также условий возбуждения плазмонов позволяют углубить новые знания о физических свойствах полупроводников, содержащих наночастицы металлов.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что новые выражения и теоретические выводы для зависимости диэлектрических функций металлических наночастиц от длины волны падающего на них света, их плазмонных и электрофизических параметров, а также условий возбуждения плазмонов позволяют создание новых плазмонных оптоэлектронных устройств на основе полупроводников, в том числе солнечных фотопреобразователей, фотодетекторов, фотокатализаторов, сенсоров, наноразмерных светодиодов, миниатюрных (~44 нм) генераторов когерентного излучения - плазмонных лазеров и усиления молекулярной флуоресценции.

Внедрение результатов исследования. На основе исследования физических процессов поглощения фотонов, фотогенерации и переноса неосновных носителей заряда в конструкциях кремниевых фотоэлектрических структур с наночастицами смоделированных на основе цифровых технологий:

Предложен новый способ получения наночастиц «Фотоэлектрический преобразователь и способ его приготовления» (Патент № ИАП 06512 от 18.05.2021). Этот метод позволил формировать равномерно распределенные металлические наночастицы на текстурированных поверхностях кремния для изготовления фотоэлектрических преобразователей новых конструкций, позволяющих эффективно использовать эффекты квантового масштаба;

цифровые вычислительные методы и результаты экспериментальных исследований использованы при производстве фотоэлектрических устройств с улучшенными параметрами на АО «Фотон». (Справка АО от 12.12.2022 № 352). В результате удалось повысить эффективность фотоэлектрических устройств за счет введения металлических наночастиц.

Аппробация результатов исследований. Основные результаты диссертации были представлены и обсуждены на 6 международных и 4 республиканских научных конференциях.

Опубликованность результатов исследования. Всего по теме диссертации опубликовано 28 научных работ, из них 5 статей опубликованы в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации научных результатов докторских диссертаций. По тематике диссертационной работы получены 1 патент и 3 авторских свидетельства на программные продукты ЭВМ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка опубликованных работ. Текст диссертации представлен на 120 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновывается актуальность темы, констатируется степень изученности проблемы, формулируются цель и задачи исследования, описываются предмет, объект и методы исследования, научная новизна и практические результаты, показаны результаты исследований и объяснена научная и практическая значимость полученных результатов.

Глава I под названием «**Исследование свойств полупроводников с наночастицами**» содержит обзор исследований по повышению эффективности фотоэлектрических устройств, методы синтеза наночастиц, в частности, методы, основанные на химических реакциях в твердых телах, методы нанохимии, метод обратных мицелл, метод нанолитографии получения металлических наночастиц и наноструктуры, информация о плазмонах, возникающих на внешней границе металла.

Во второй главе под названием «**Диэлектрические функции металлических наночастиц**» описаны механизмы возбуждения наноплазмонов, получены « ϵ -методы» решения уравнений Максвелла для частиц произвольного размера и наночастиц, а также получены новые выражения для диэлектрических функций металлов для наноплазмоники. С использованием этих выражений и на основе метода «наименьших квадратов» предлагается метод простого определения плазмонных параметров произвольных металлических наночастиц.

При одинаковых частотах волновой вектор поверхностного плазмона больше волнового вектора свободного фотона, и поэтому возбудить поверхностные плазмоны обычными фотонами невозможно [2]. Поверхностные плазмоны возникают на частотах, когда диэлектрическая проницаемость одной

из сред на границе металл-внешняя среда становится отрицательной, т.е. при соблюдении условий

$$\begin{aligned}\varepsilon_m(\omega) \cdot \varepsilon_s(\omega) &< 0, \\ \varepsilon_m(\omega) + \varepsilon_s(\omega) &< 0\end{aligned}\quad (1)$$

Таким образом, нанометаллы, внедренные в поверхность полупроводников, ведут себя по-разному в зависимости от частот падающего на них электромагнитного излучения. Поэтому изучение зависимости комплексной диэлектрической проницаемости металлических наночастиц на поверхности кремния от частоты (длины волны) падающих электромагнитных волн является одной из актуальных задач наноплазмоники. В частности, диэлектрическая функция металлической наночастицы и полупроводника вокруг нее сильно связана с длиной волны падающего света при учете скачкообразного изменения электрического поля на границе и с учетом деполяризации и радиационных потерь. Известно⁴, что реальная часть диэлектрической проницаемости является функцией длины волны

$$\operatorname{Re} \varepsilon = \varepsilon_\infty - \frac{(\lambda / \lambda_p)^2}{1 + (\lambda / \lambda_f)^2} = \varepsilon_\infty - \frac{\lambda_f^2}{\lambda_p^2} \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + \lambda_f^2}\quad (2)$$

Если мы разложим это выражение в ряд Тейлора по степеням λ (λ^2), то получим

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} \varepsilon &= \varepsilon_\infty - \frac{\lambda_f^2}{\lambda_p^2} \left(\left(\frac{\lambda}{\lambda_f} \right)^2 - \left(\frac{\lambda}{\lambda_f} \right)^4 + \left(\frac{\lambda}{\lambda_f} \right)^6 \right) = \\ &= \varepsilon_\infty - \frac{\lambda^2}{\lambda_p^2} + \frac{\lambda^4}{\lambda_p^2 \lambda_f^2} - \frac{\lambda^6}{\lambda_p^2 \lambda_f^4}\end{aligned}\quad (3)$$

С другой стороны, по результатам эксперимента можно определить связи между любыми двумя физическими величинами с помощью метода наименьших квадратов.

Результаты эксперимента между $\operatorname{Re} \varepsilon$ и λ представив в виде⁴.

$$\operatorname{Re} \varepsilon = A_0 + A_1 \lambda^2 + A_2 \lambda^4 + A_3 \lambda^6\quad (4)$$

можно определить A_i методом «наименьших квадратов» и сравнить выражения (3) и (4). Тогда получим

$$\varepsilon_\infty = A_0,\quad (5)$$

$$\lambda_p = 1 / \sqrt{-A_1},\quad (6)$$

⁴James W. Fleming, Marvin J. Weber et al. Handbook of Optical Materials 4th ed. Boca Raton, 2018, pages 536, eBook ISBN 9781315219615, DOI <https://doi.org/10.1201/9781315219615>

$$\lambda_f = 1/\lambda_p \sqrt{A_2} \quad (7)$$

На основе *Visual Basic* была создана программа для исследования зависимости диэлектрической проницаемости металлов от длины волны падающих электромагнитных волн. Результаты, полученные с помощью этой программы, отправляются в MS Excel, иллюстрируются с помощью графиков, сравниваются с результатами экспериментов и используются для расчета основных параметров солнечных элементов на основе кремния с металлическими наночастицами.

В качестве примера, плазмонные коэффициенты металлов, таких как золото (Au), серебро (Ag) и медь (Cu), по результатам эксперимента, представленного в были определены с использованием программы. Результаты расчетов представлены в табл. 1. Полученные результаты практически согласуются с результатами, представленными в работе⁴. В таблице также приведены значения χ^2 , которые показывают точность результатов расчета.

Таблица 1. Плазмонные и электрофизические параметры металлов

элемент	$\lambda_p, \mu\text{м}$	$\lambda_f, \mu\text{м}$	ϵ_∞	χ^2	$A, \text{эВ}$	$m^*, \text{эВ}$	$n, \text{см}^{-3}$	$\sigma, \text{См}$	$\tau, \text{с}$
Ag	0,126	4,056	6,781	0,24	4,52	1	7,0E+12	4,3E+06	2,15E-15
Al	0,05	0,775	28,047	1,05	4,41	0,97	4,3E+13	5,2E+06	4,11E-16
Au	0,143	7,492	8,763	0,20	5,1	0,99	5,4E+12	6,1E+06	3,98E-15
Cu	0,149	3,412	6,296	0,33	4,53	1	5,0E+12	2,6E+06	1,81E-15
Ni	0,13	0,908	4,95	0,04	5,04	1	6,6E+12	9,0E+05	4,82E-16
Pt	0,164	1,298	0,248	0,02	5,12	1	4,2E+12	8,1E+05	6,89E-16
Ti	0,149	0,718	3,606	0,09	4,33	3,95	1,9E+13	5,4E+05	3,81E-16
Zn	0,086	0,631	6,145	0,57	4,2	0,85	1,3E+13	1,4E+06	3,35E-16

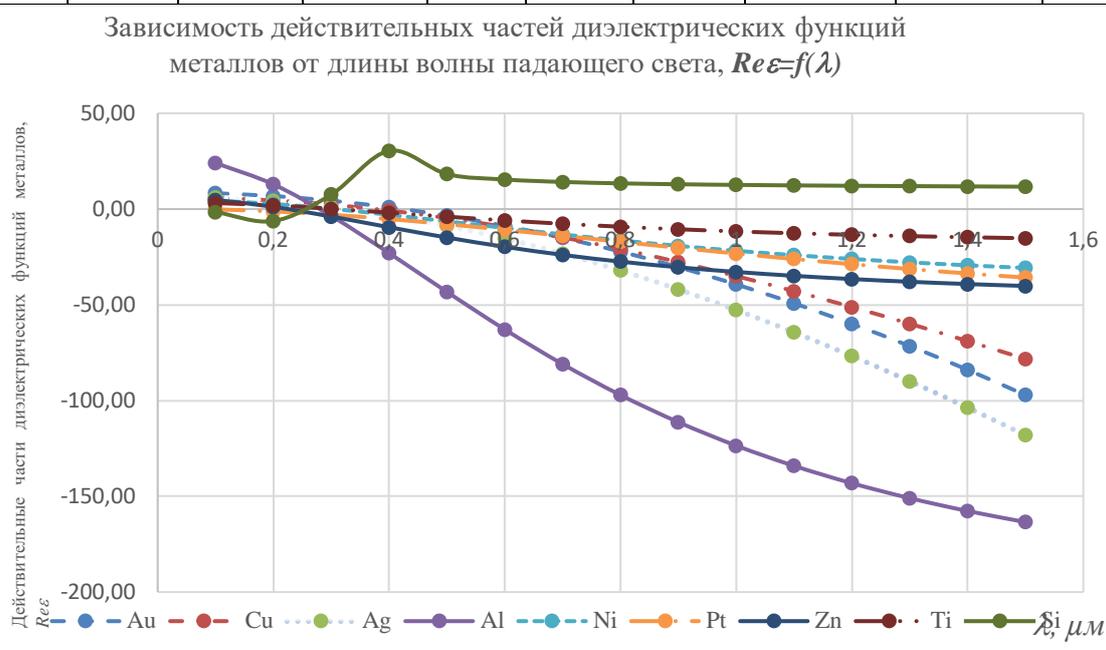


Рисунок 1. Зависимость действительных частей диэлектрических функций металлов от длины волны падающего света, $Re\epsilon=f(\lambda)$

В таблице 2 показаны значения, при которых выполняются условия (1), т. е. значения, при которых могут возбуждаться плазмоны (выделено красным). Из результатов видно, что плазмоны могут возбуждаться при длине волны падающего света $\lambda=0,2$ мкм и $\lambda>0,6$ мкм в Ag, $\lambda=0,3$ мкм и $\lambda>0,5$ мкм в Al, $\lambda=0,3$ мкм в Au и $\lambda>0,7$ мкм, $\lambda=0,2$ мкм и $\lambda>0,7$ мкм в Cu, $\lambda=0,2$ мкм и $\lambda>0,8$ мкм в Ni, $\lambda=0,3$ мкм и $\lambda>0,7$ мкм в Pt $\lambda=0,2$ мкм и $\lambda>1,1$ мкм в Ti и $\lambda=0,2$ мкм, $\lambda=0,2$ мкм и $\lambda>0,6$ мкм в Zn.

Таблица 2. Зависимость действительных частей диэлектрических функций металлов от длины волны падающего света, $Re\varepsilon=f(\lambda)$

$\lambda, \mu\text{м}$	Ag	Al	Au	Cu	Ni	Pt	Ti	Zn
0,1	6,15	24,07	8,27	5,85	4,37	-0,12	3,17	4,81
0,2	4,26	12,90	6,80	4,51	2,69	-1,21	1,94	1,18
0,3	1,13	-3,57	4,36	2,29	0,15	-2,95	0,17	-3,89
0,4	-3,21	-22,99	0,95	-0,78	-2,97	-5,22	-1,87	-9,46
0,5	-8,75	-43,26	-3,42	-4,68	-6,39	-7,89	-3,95	-14,86
0,6	-15,44	-62,88	-8,75	-9,36	-9,87	-10,85	-5,91	-19,72
0,7	-23,23	-80,96	-15,02	-14,79	-13,22	-13,95	-7,67	-23,90
0,8	-32,08	-97,12	-22,21	-20,91	-16,35	-17,10	-9,21	-27,44
0,9	-41,92	-111,27	-30,32	-27,66	-19,21	-20,21	-10,53	-30,38
1	-52,7	-123,54	-39,33	-35,00	-21,76	-23,22	-11,66	-32,82
1,1	-64,3	-134,09	-49,22	-42,85	-24,04	-26,09	-12,62	-34,85
1,2	-76,7	-143,17	-59,96	-51,17	-26,04	-28,79	-13,43	-36,54
1,3	-89,9	-150,96	-71,55	-59,88	-27,81	-31,30	-14,12	-37,95
1,4	-103,7	-157,67	-83,95	-68,93	-29,35	-33,63	-14,71	-39,14
1,5	-118,1	-163,46	-97,13	-78,26	-30,71	-35,78	-15,21	-40,15

Плазмонные параметры также позволяют рассчитывать электрофизические параметры металлов. Из выражений

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m^*} \quad (8)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (9)$$

можно определить концентрацию носителей заряда

$$n = \frac{m^* \pi c^2}{e^2 \lambda_p^2} \quad (10)$$

Время релаксации носителей заряда определяется по формуле

$$\tau = \frac{\lambda_f}{2\pi c} \quad (11)$$

Если подставить эту формулу в выражение электропроводности,

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \quad (12)$$

то получим новое выражение для электропроводности

$$\sigma_0 = \frac{c\lambda_f}{2\lambda_p^2} \quad (13)$$

В табл. 1 также приведены основные электрофизические параметры металлов, рассчитанные по формулам (10), (11) и (13).

В третьей главе под названием **«Уравнение Шредингера для наночастиц, внедренных в полупроводник»** сформулированы уравнения Шредингера и представлены решения для описания движения электрона в наночастице при прямоугольных, параболических и треугольных потенциалах. Методы решения уравнения Шредингера, описывающего, как электрон поглощает свет и покидает наночастицу, представлены с использованием теории возмущений. Также описаны методы численного решения уравнения Шредингера для потенциалов произвольного вида. В качестве примера решается уравнение Шредингера для потенциалов в прямоугольной, параболической и треугольной формах, а результаты представляются в MS Excel.

В четвертой главе под названием **«Сечение фотоэмиссии наночастиц, внедренных в кремний»**, получены выражения для амплитуды и сечения вероятности фотоэмиссии с учетом электромагнитного поля, эффективной массы электрона и изменения потенциала при границе раздела металл-полупроводник. Полученные выражения были применены к фотоэмиссии кремния из наночастиц. В частности, рассмотрена поверхностная фотоэмиссия металлических наночастиц с учетом возбуждения ЛПП электрическим полем и изменения эффективной массы электрона на поверхности, что приводит к резкому увеличению фотоэмиссии.

Одним из явлений, связанных с переносом носителей заряда при возбуждении ЛПП в наночастицах, является фотоэмиссия из наночастиц. Фотоэмиссия наночастиц велика (по сравнению с длиной волны света), существенно отличается от фотоэмиссии "макроскопических" металлических структур (например, металлических слоев), поскольку, во-первых, при возбуждении ЛПП ЭМ поле находится внутри частицы и вне ее сильно увеличивается в областях, близких к поверхности наночастиц; во-вторых, отношение поверхности наночастицы к ее объему значительно больше, чем у макроскопических структур. Вторая причина важна, поскольку поверхностный фотоэффект, который является основным вкладчиком в фотоэмиссию, возникает, когда электрон поглощает фотон, покидает металл и сталкивается с поверхностью. Для определения величины фотоэмиссии с наночастиц и определения оптимальных параметров, при которых фотоэмиссия с наночастиц максимальна, необходимо рассчитать сечение фотоэмиссии с наночастиц. Основная цель данной работы – рассчитать сечение поверхностной фотоэмиссии металлических частиц с учетом возбуждения в них ЛПП и на основе этих расчетов показать, что фотоэмиссия из наночастиц значительно эффективнее, чем из сплошного слоя металла. В этой главе сечение фотоэмиссии наночастиц рассчитано на основе классической теории, изложенной в монографии

А.М.Бродского и Ю.Я.Гуревича. Результат этой теории обобщается путем учета поверхностных эффектов для вероятности фотоэмиссии, т. е. изменения электрического поля и массы электрона на поверхности частиц. Важным новым результатом является то, что сечение фотоэмиссии изменяется в несколько раз с учетом упомянутых выше поверхностных эффектов. Учет поверхностных эффектов особенно важен для фотоэмиссии наночастиц с относительно большой площадью поверхности по сравнению со сплошным металлическим слоем.

На основе теории возмущений получено выражение для амплитуды вероятности фотоэмиссионного электрона, движущегося в направлении, перпендикулярном границе раздела

$$C_+(\infty) = \frac{|e|m}{\hbar\omega W_1} \int_{-\infty}^{\infty} dz (E_m \frac{d\Psi_0}{dz} \Psi_{1-} + \frac{1}{2} \Psi_{1-} \Psi_0 \frac{dE_m}{dz}) \quad (14)$$

В общем случае амплитуда вероятности фотоэмиссии пишется в виде

$$C_+(\infty) = \frac{|e|m}{W_1(\hbar\omega)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz (C_V + C_E + C_m) / m \quad (15)$$

где C_V , C_E , C_m – потенциал, электромагнитное поле и фотоэмиссия с учетом изменения массы электрона на границе раздела:

$$C_V = -EV' \Psi_0 \Psi_{1-}, \quad (16)$$

$$C_E = E' \{ (\hbar^2 / 2m) \Psi_0' \Psi_{1-} + [E_0 - V + \hbar\omega / 2] \Psi_0 \Psi_{1-} \}, \quad (17)$$

$$C_m = Em' / m [E_0 - V + \hbar\omega / 2] \Psi_0 \Psi_{1-} \quad (19)$$

Сечение фотоэмиссии металлических наночастиц и фототок определяется выражениями

$$\sigma_{ph-em} = \frac{8\pi\hbar\omega}{cn_+} C_{em} |F|^2 K_{geom}, \quad (19)$$

$$J_{ph-em} = C_{em} |F|^2 K_{geom} |E|^2 \quad (20)$$

здесь $n_+ = \text{Re} \sqrt{\varepsilon_+}$,

$C_{em} = \frac{e^2 k T V^2}{\pi^2 \hbar^5 \omega^4} \int dx [1 + (\hbar\omega / V - 1) / x]^{1/2} \ln(1 + \exp(\frac{E_f - Vx}{kT})) U(x) |K_{dis}(x)|^2$ - вероятность фотоэмиссии;

$$U(x) = \frac{4r_m^2}{(r_m + 1)^2} \frac{x}{[x + r_m(1-x)] \{ (x + \hbar\omega / V)^{1/2} + [r_m(x + \hbar\omega / V - 1)]^{1/2} \}^2},$$

$$K_{dis}(x) = \frac{1}{2} (1 + \varepsilon_- / \varepsilon_+) [1 + \frac{1-r_m}{1+r_m} (2x + \hbar\omega / V - 1)] + \frac{1}{2} (1 - \varepsilon_- / \varepsilon_+) [x + \hbar\omega / V]^{1/2} + i(1-x)^{1/2}]^2 -$$

$F = \frac{1}{1 + R_{dep} - iR_{rad}} \frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + (\varepsilon_- - \varepsilon_+)L}$ - функции, учитывающие изменение электрического

поля на границе, $R_{dep} = \frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + (\varepsilon_- - \varepsilon_+)L} (A\varepsilon_+ y^2 + B\varepsilon_+^2 y^4)$, $R_{rad} = \frac{16}{9r} (\frac{\pi_+ a}{\lambda})^3 \frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + (\varepsilon_- - \varepsilon_+)L}$

$L = \frac{r^2}{2} \int \frac{du}{(u+r^2)^2 (u+1)^{1/2}}$ - функция, учитывающая деполяризационные и радиационные потери,

$$\varepsilon_-(\lambda) = \varepsilon_m(\lambda) + (\lambda/\lambda_p)^2 \left[\frac{1}{1+i\lambda/\lambda_f} - \frac{1}{1+(i\lambda/\lambda_f)(a_c/a+1)} \right], \quad \varepsilon_m(\lambda) = \varepsilon_\infty + (\lambda/\lambda_p)^2 \frac{1}{1+i\lambda/\lambda_f},$$

$$\varepsilon_+(\lambda) = \varepsilon_\infty + \sum_{i=1}^3 \frac{C_i}{1 - \left(\frac{1.242}{\lambda E_i}\right)^2 - i \frac{1.242}{\lambda E_i} \gamma_i} - F_1 \chi_1^{-2}(\lambda) \ln[1 - \chi_1^2(\lambda)] - F_2 \chi_2^{-2}(\lambda) \ln \frac{1 - \chi_1^2(\lambda)}{1 - \chi_2^2(\lambda)} -$$

- диэлектрические функции нанометаллов и кремния.

На основе приведенных выше выражений на Visual Basic была создана программа для расчета плазменных параметров металлов, а также зависимых от длины волны сечения фотоэмиссии, тока фотоэмиссии и напряженности электрического поля металлических наночастиц. Программа позволяет вводить и изменять работу выхода, энергию Ферми, эффективную массу электрона, плазменные параметры, размеры наночастиц и многое другое. Преимуществом программы является то, что результаты расчетов в единой программной среде экспортируются в MS Excel и представляются не только в табличном, но и в графическом виде. Результаты расчетов представлены в виде графиков. По результатам расчета спектральной зависимости сечения фотоэлектронной эмиссии (σ) металлических наночастиц размером $a=10$ нм в кремнии (рис. 2) в качестве наночастиц можно использовать не только благородное золото, но и серебро и медь. Кроме того, наночастицы меди имеют самые высокие значения сечения фотоэлектронной эмиссии. На рис. 3 представлена зависимость параметров плазмона металла (λ_f) от разности работы выхода электронов из металла и кремния. Как видно из рисунка, наибольших значений эта величина достигает в золоте, серебре и меди. Именно поэтому сечение фотоэмиссии, представленное на рисунке 2, достигает наибольших значений для этих металлов. На рис. 4 представлены результаты расчета спектральной зависимости сечения фотоэлектронной эмиссии (σ) наночастиц металла (Cu) в кремнии в зависимости от их размера. Как видно из рисунка, наибольшее значение сечения фотоэлектронной эмиссии достигается при размере наночастиц $a=4$ нм. С увеличением размера наночастиц меди сечение фотоэлектронной эмиссии уменьшается, а максимальная часть кривой смещается вправо. На рис.5 представлены результаты расчета спектральной зависимости напряженности электрического поля фотоэлектронной эмиссии (F^2) металлических наночастиц в кремнии. Как видно из рисунка, наибольшее значение интенсивности достигается для золота. На рис.6 представлены результаты расчета спектральной зависимости тока фотоэмиссии (J_{fem}) металлических наночастиц на кремнии. Как видно из рисунка, наибольшее значение тока фотоэмиссии соответствует серебру и меди.

На рис. 7 представлены результаты расчета спектральной зависимости участков фотоэлектронной эмиссии и поглощения (σ) наночастиц металла (Cu) радиусом $a=4$ нм в кремнии. Как видно из рисунка, сечение фотоэлектронной эмиссии в точке максимума составляет $\sim 0,15$ сечения поглощения, т.е. 15%. Таким образом, $\sim 15\%$ поглощенных фотонов превращаются в фотоэлектроны.

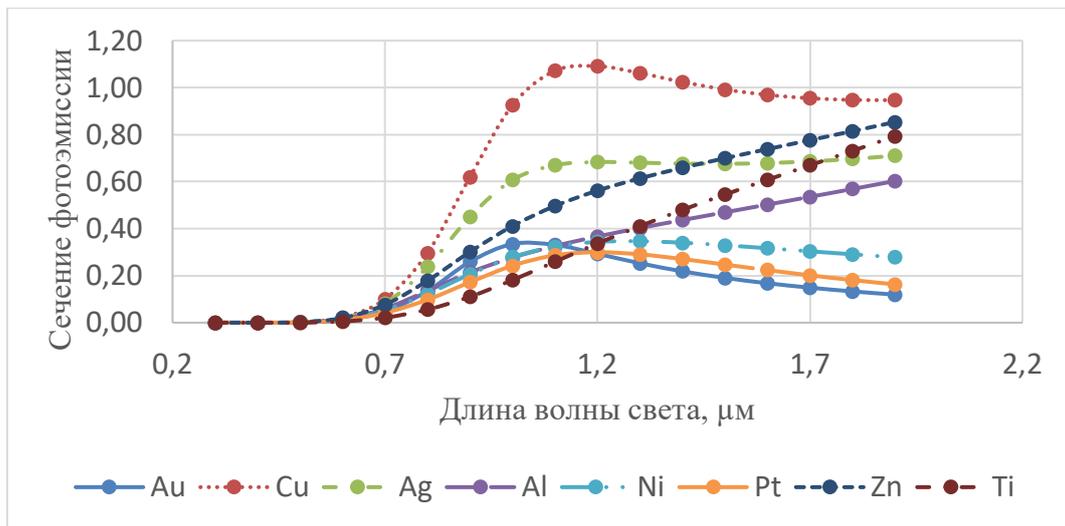


Рисунок 2. Спектральная зависимость сечения фотоэлектронной эмиссии (σ) металлических наночастиц размером $a=10$ нм в кремнии

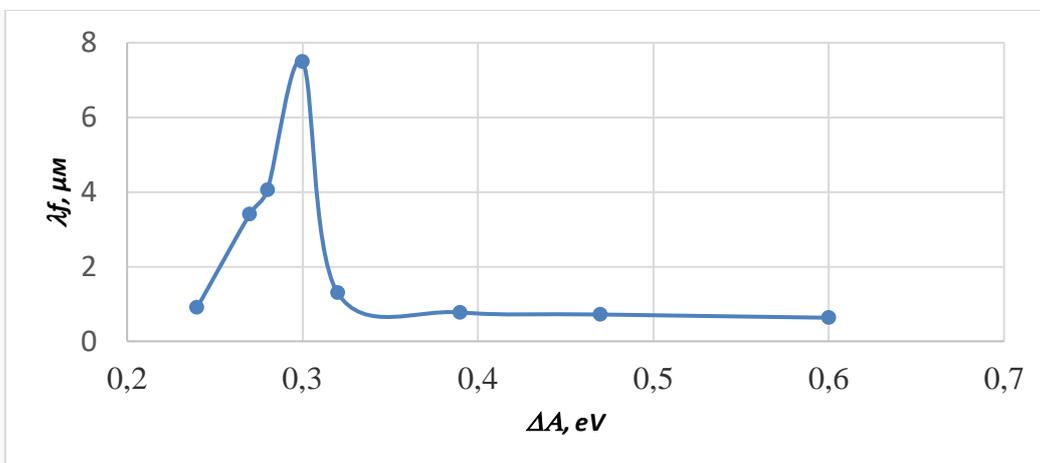


Рисунок 3. Зависимость параметров металлического плазмона (λ_p) от разности работы выхода электронов из металла и кремния

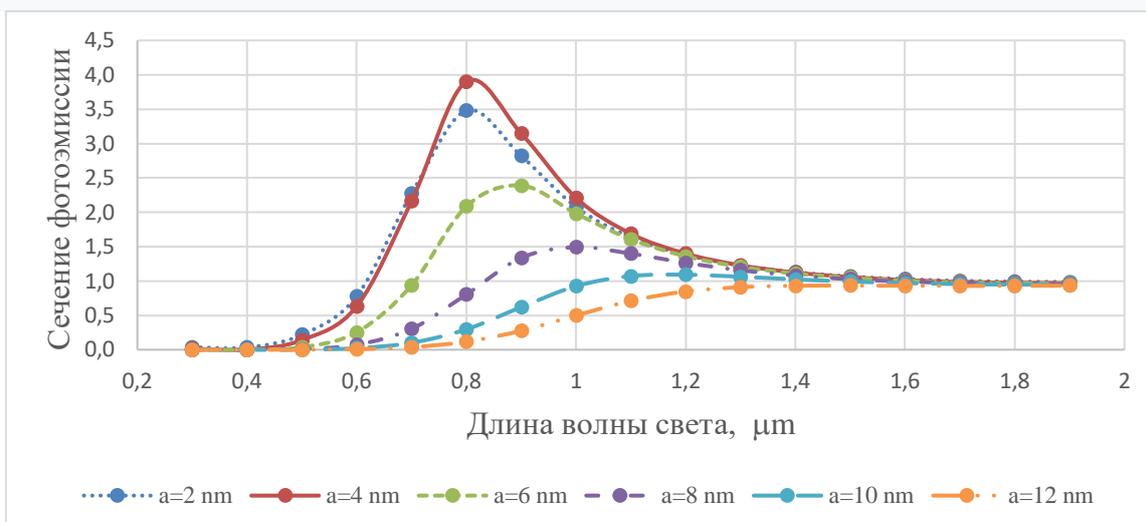


Рисунок 4. Спектральное распределение сечения фотоэлектронной эмиссии (σ) наночастиц металлической меди (Cu) в кремнии в зависимости от размера наночастиц

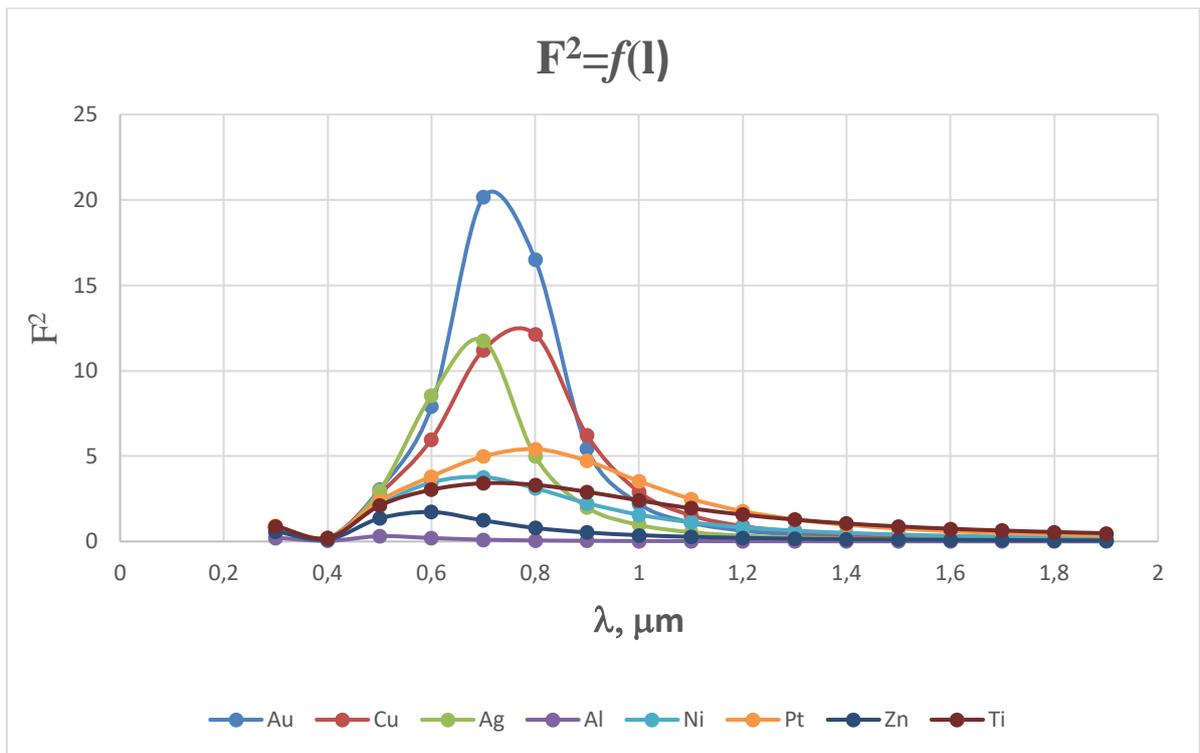


Рисунок 5. Фотоэлектронная эмиссия (F^2) металлических наночастиц в кремнии как спектральная зависимость увеличения напряженности электрического поля.

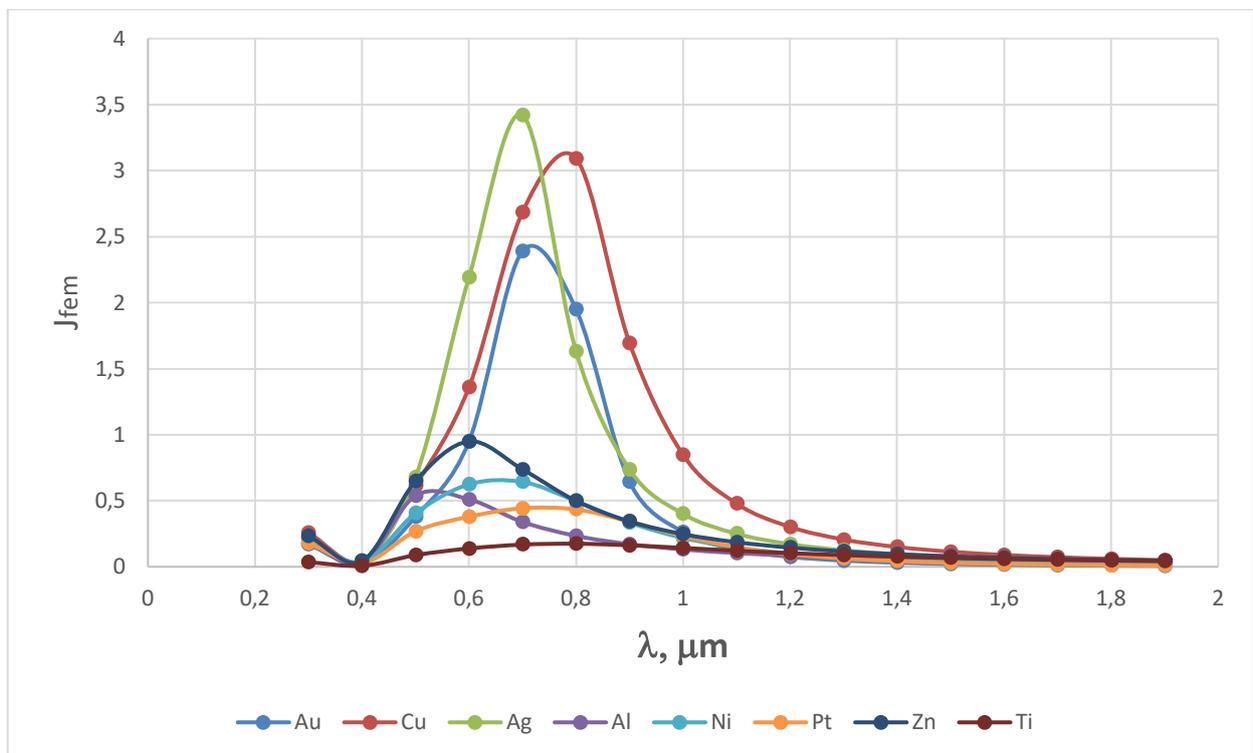


Рисунок 6. Спектральная зависимость тока фотоэмиссии (J_{fem}) металлических наночастиц на кремнии

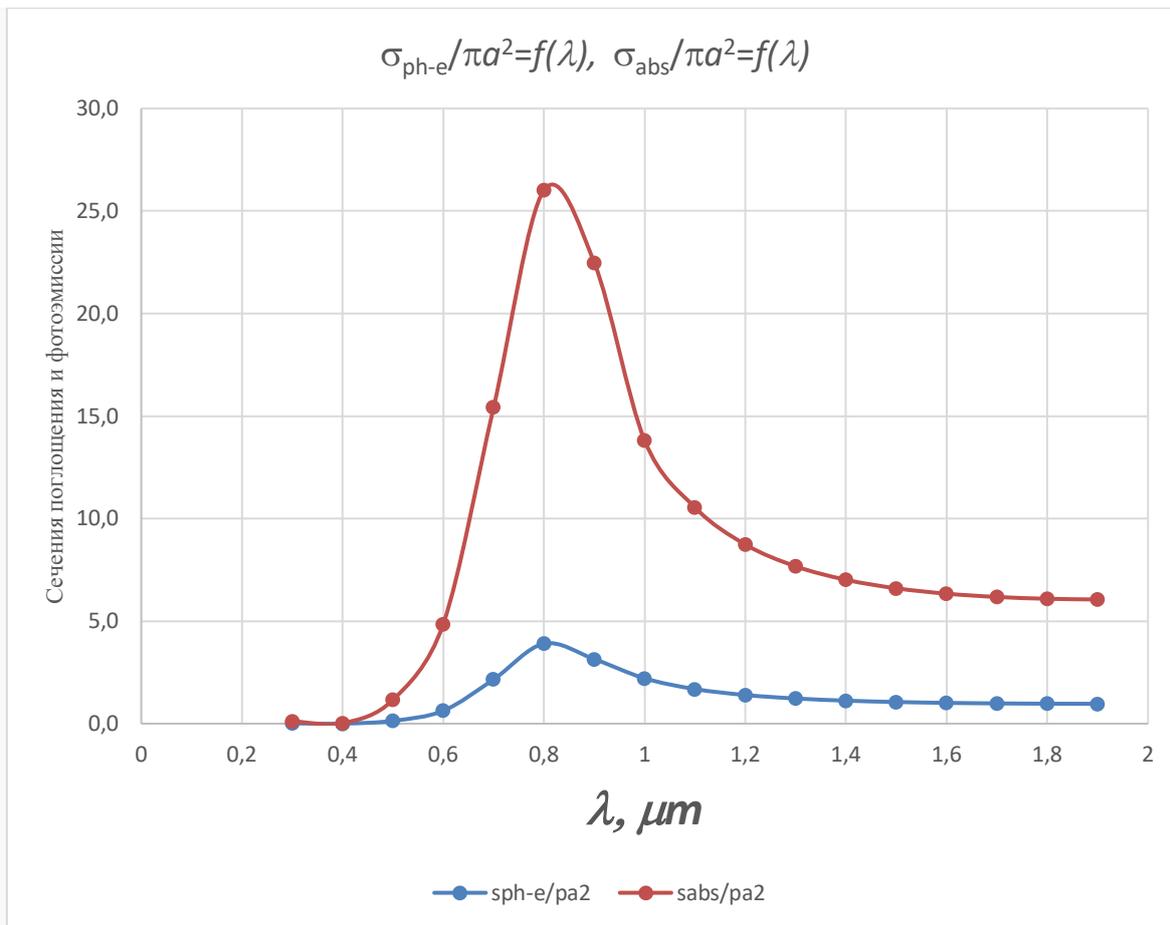


Рисунок 7. Спектральная зависимость сечений фотоэлектронной эмиссии и поглощения (σ) наночастиц металла (Cu) радиусом $a=4$ нм в кремнии

Таким образом, наиболее важными результатами исследования являются следующие:

- На Visual Basic разработана программа для расчета параметров плазмы металлов, а также сечения электрического поля внутри фотоэмиссионной наночастицы, тока фотоэмиссии и коэффициента увеличения интенсивности в зависимости от длины волны падающего света.
- программа позволяет вводить и изменять значения работы выхода, энергии и эффективной массы электрона, параметров плазмона, размеров наночастиц и др. В единой программной среде результаты расчетов экспортируются в MS Excel и выражаются не только в табличной, но и в графической форме;
- определены оптимальные размеры наночастиц металлов для более эффективной реализации эффекта наноплазмоники;
- было показано, что в качестве материала наночастиц можно использовать не только драгоценные золото и серебро, но и медь. Кроме того, наночастицы меди имеют самые высокие значения сечения фотоэлектронной эмиссии и тока фотоэмиссии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате комплексного изучения с помощью современного цифрового технологического моделирования и углубленного анализа основных фотоэлектрических свойств кремния, внедренного наночастицами, определен ряд новых физических свойств, предложены новые технические решения и сформированы следующие основные выводы:

1. На основе «метода наименьших квадратов» предложено новое выражение для зависимости диэлектрических функций металлических наночастиц от длины волны падающего на них света и новый метод определения плазмонных параметров. Это выражение позволяет определить условия возбуждения плазмона.

2. На основе полученных плазмонных параметров предложены новые выражения для расчета основных электрофизических параметров металлических наночастиц, таких как концентрация носителей заряда, время релаксации, электропроводность.

3. Решались уравнения Шрёдингера, соответствующие разным формам потенциала для электронов, движущихся в металлических наночастицах и способных выйти в кремний под действием света.

4. На основании диэлектрических функций и плазмонных параметров металлических наночастиц определены наиболее оптимальные типы металлов и их размеры для фотоэмиссии на кремний;

5. При фотоэмиссии из наночастиц металлов (меди) в кремний было показано, что напряженность электрического поля внутри наночастицы может увеличиваться до ~ 20 раз.

6. Максимальное значение тока фотоэмиссии, генерируемого при фотоэмиссии с наночастиц металлов (меди) на кремний, составило $\sim 3,5$ мА/см².

7. В результате исследования спектральной зависимости сечений фотоэлектронной эмиссии и поглощения (σ) наночастиц металла (Cu) радиусом $a=4$ нм в кремнии установлено, что $\sim 15\%$ поглощенных фотонов превращаются в фотоэлектроны.

8. Разработаны и официально зарегистрированы программные продукты ЭВМ на основе «Визуальный Бейсик» «Уравнение Шрёдингера» (№ ДГУ 20866, 2022 г.), «Диэлектрические функции металлов для наноплазмоники» (№ ДГУ 17752, 2022 г.), «Сечение фотоэмиссии из металлических наночастиц» (№ ДГУ 17966, 2022 г.), позволяющие комплексно исследовать основные фотоэлектрические свойства кремния, внедренного металлическими наночастицами.

9. Предложен новый метод формирования равномерно распределенных металлических наночастиц на текстурированных поверхностях кремния для изготовления фотоэлектрических преобразователей новой конструкции, позволяющей эффективно использовать квантово-размерные эффекты, и (ИАП № 06512 Республики Узбекистан от 18.05.2021 г.) зарегистрирован патентом «Способ приготовления фотоэлектрического преобразователя».

**SCIENTIFIC COUNCIL PhD.03/30.11.2022.FM/T.66.04 FOR THE
AWARDING OF SCIENTIFIC DEGREES AT THE NAMANGAN
INSTITUTE OF ENGINEERING AND TECHNOLOGY**

ANDIJAN STATE UNIVERSITY

YULDASHEVA NAZOKATKHAN MUROD QIZI

**INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF METALLIC
NANOPARTICLES ON THE PROPERTIES OF SILICON**

01.04.10 - Physics of semiconductors

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

Namangan-2023

The theme of dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered by Supreme Attestation Commission under the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2022.4.PhD/FM823.

The dissertation was carried out at the Andijan State University.

The abstract of the dissertation was posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the website of the Scientific Council at www.ispm.uz and on the website of "ZiyoNet" information and educational portal at www.ziynet.uz.

Scientific supervisor: **Zaynabidinov Sirojiddin**
doctor of physics and mathematics,
Academician of the Academy of Sciences R.Uz

Official opponents: **Gulyamov Gafur**
doctor of physics and mathematics, professor;

Nasirov Abdumanap Abdulmajidovich
candidate of physics and mathematics, dotsent

Leading organization: **Fergana State University**

The defence of the doctoral dissertation will be held on «__» _____ 2023 at ____ at the meeting of the Scientific Council No.DSc.03/30.12.2019.FM/T.01.12 for the awarding of scientific degrees at the Namangan institute of engineering technologies (Address: 160115, 7, Kosonsoy str., 100057, Namangan city, Uzbekistan. Tel.: (+99869) 225-10-07; fax: (+99869) 225-76-75, e-mail: niei_nfo@edu.uz, Conference Hall of the Namangan institute of engineering technologies).

The doctoral dissertation can be looked through in the ICT Implementation Unit (registered under № ____). Address: 160115, 7, Kosonsoy str., 100057, Namangan city, Uzbekistan. Tel.: (+99869) 225-10-07; fax: (+99869) 225-76-75, e-mail: niei_nfo@edu.uz

The abstract of the dissertation was distributed on «__» _____ 2023
(Registry record No. _____ dated «__» _____ 2023).

U.I.Erkaboev
Chairman of the Scientific Council
on Award of Scientific Degrees,
Doctor of Physical and Mathematical
Sciences, Dotsent

B.X.Quchqarov
Scientific secretary of the Scientific
Council on Award of Scientific Degrees,
Doctor of philosophy (PhD)

N.Yu.Sharibaev
Academic Council that grants academic degrees
the chairman of the scientific seminar under
Doctor of Physical and Mathematical
Sciences, Professor

INTRODUCTION (abstract of the PhD dissertation)

The aim of the research work is to determine the optimal conditions for the introduction of metal nanoparticles to improve the optical and electrophysical properties of silicon, based on the laws of classical and quantum physics.

The object of the research is a silicon modeled on the basis of digital technologies containing nanoparticles.

The subject of the research is the electrophysical and optical properties of monocrystalline silicon modeled on the basis of digital technologies with various metal nanoparticles.

The scientific novelty of the research is as follows:

new expressions that calculate the dielectric functions of metal nanoparticles depending on the wavelength of the light incident on them and their main electrophysical parameters, such as the concentration of charge carriers, relaxation time, and electrical conductivity depending on plasmonic parameters are obtained;

the dependence of the photoemission cross section from metal nanoparticles to silicon on the type and size of metal nanoparticles is shown, and it is determined that the most suitable type of metal is copper and its size should be ~ 4 nm;

during photoemission from metal nanoparticles into silicon, the electric field strength inside the nanoparticle increases up to 20 times, and this value is the largest for a gold nanoparticle, and the maximum value of the photoemission current is the largest for gold ~ 3.5 mA/cm² was determined;

as a result of comparing the spectral dependence of the photoelectron emission and absorption cross sections (σ) of metal (Cu) nanoparticles with a radius $a=4$ nm in silicon, that $\sim 15\%$ of the absorbed photons are converted into photoelectrons was determined.

The practical results of the research are as follows:

a new method for the formation of evenly distributed metal nanoparticles on textured silicon surfaces has been developed to obtain photoelectric converters with a new structure that allows efficient use of quantum scale effects;

a computer program was created that allows numerically solving the Schrödinger equation for an arbitrary potential in order to determine the optimal potential for electrons moving in metal nanoparticles and capable of escaping into silicon under the action of light;

a computer program was created to determine the dependence of the dielectric functions of metal nanoparticles on the wavelength of the light incident on them, their plasmonic and electrophysical parameters, and the conditions for excitation of plasmons.

Application of research results:

Based on the study of the physical processes of photon absorption, photogeneration and transfer of minority charge carriers in the designs of silicon photovoltaic structures with nanoparticles modeled on the basis of digital technologies:

a new method for obtaining nanoparticles "Photoelectric converter and method for its preparation" (Patent No. IAP 06512 dated May 18, 2021) has been proposed.

This method made it possible to form evenly distributed metal nanoparticles on textured silicon surfaces for the manufacture of photovoltaic converters of new designs that allow efficient use of quantum scale effects.

digital computational methods and the results of experimental studies were used in the production of photovoltaic devices with improved parameters at Foton JSC. (Certificate of AO dated 12.12.2022 No. 352). As a result, it was possible to increase the efficiency of photovoltaic devices by introducing metal nanoparticles.

Dissertation structure and size. The dissertation consists of an introduction, 4 chapters, a conclusion and references. The text of the thesis is presented on 120 pages.

E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YHATI
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS
I бўлим (Часть I; Part I)

1. Алиев Р., Мўйдинова М., Юлдашева Н., Алиев С. Фотоэлектрический преобразователь и способ его изготовления, Патент РУз № IAP 06512 18.05.2021.
2. Yuldasheva N., Nosirov M., Matboboeva S., Gulomov J. Semi-Empirical Plasmon Coefficients of Metals for Nanoplasmonics//Journal of Nano- and Electronic Physics. 2022. Vol.14, No 4, pp.04024. (№ 3, Scopus, IF:0.72).
3. Зайнобидинов С., Юлдашева Н., Носиров М. Кремнийда металл нанозарралардан фотоэмиссия кесими// ЎзР ФА Маърузалари. 2021, №3, 19-25 бетлар (01.00.00. №7)
4. Юлдашева Н., Носиров М. Яримўтказгич сиртига киритилган металл нанозарраларнинг диэлектрик функциялари // Scientific bulletin Physical and Mathematical Research. 2022, №1, p. 5-9. (01.00.00. №13).
5. Yuldasheva N. Nanoplazmonika uchun metallarning plazmonik va elektrofizik parametrlari // NamDU ilmiy axborotnomasi. 2023, №2, 31-35 b. (01.00.00. №14).
6. Зайнобиддинов С., Алиев Р., Юлдашева Н., Фуломов Ж. Диэлектрик сингдирувчанлигининг частотага боғликлиги // мат. Межд конф. “Тенденция развития современной физики полупроводников, проблемы, достижения и перспективы”, Ташкент, 2020, с.19-24. (О‘зР VM huzuridagi ОАКning 2020 yil 13 maydagi №113-Qarori).

II бўлим (Часть II; Part II)

7. Юлдашева Н. Плазмонные и электрофизические параметры металлов для наноплазмоники. Мат. международной конференции академических наук, Россия, 2023, с.135-140, <https://doi.org/10.5281/zenodo.7679520>
8. Юлдашева Н. Фотоэмиссия из металлических наночастиц в кремний//American Journal of Pedagogical and Educational Research, V.5, 2022, p. 12-17.
9. Юлдашева Н., Носиров М., Алиев Р. Стабилизация характеристик кремниевых солнечных элементов внедрением наночастиц некоторых металлов// East European Scientific Journal, 2020, 4(56), p.67-71.
10. Юлдашева Н., Носиров М., Матбобоева С., Мирзакаримова М. Dielectric functions of metals for nanoplasmonics// German Internatinal journal of Modern Sciences, 2022, № 33, p. 48-52.
11. Юлдашева Н., Носиров М. Сечение фотоэмиссии из металлических наночастиц//Universuim: Технические науки, № 8(1012), 2022, с. 14-17.
12. Юлдашева Н., Матбабаева С., Носиров М., Кучкарова М. Численное решение уравнения Шредингера для произвольного потенциала//Научный импульс, 2022, № 4 (100), с. 718-722.

13. Юлдашева Н. Повышение эффективности солнечных элементов с помощью эффекта наноплазмоники. Материалы III -международная научная конференция НПМФ-2022 “Наноструктурные полупроводниковые материалы в фотоэнергетике”, Ташкент, 2022, с. 123-127.
14. Юлдашева Н. Металл нанозаррачаларда фотоэмиссия Яримўтказгичли микроэлектроника, нанотехнологиялар ва ноанъанавий энергия манбалари физикасикасиниг долзарб муаммолари” мавзусидаги респ. Илмий-амалий анжумани материаллари, Андижон. 2021 й., 61-64 б.
15. Алиев Р., Юлдашева Н., Зиётдинов Ж., Носиров М. Металлар диэлектрик сингдирувчанлигининг частотага боғлиқлиги. “RENES: қайта тикланувчи энергия манбалар ва барқарор атроф мухит соҳасида магистрлик дастурини ишлаб чиқиш” лойихаси доирасидаги Халқаро семинар мақолалари тўплами, Гулистон, 2019, 140-144 б.
16. Алиев Р., Юлдашева Н., Ж.Алиева, М.Носиров, Г.Нурматова Наноплазмоника – замонавий фотоўзгартиргичлар асоси “Яримўтказгичлар физикасининг ва қайта тикланувчи энергия манбаларини ривожлантиришнинг замонавий муаммолари” Республика илмий-амалий анжумани материаллари Андижон, 2018 йил 20-21 апрель, 101-103 б.
17. Юлдашева Н., Носиров М., Гуломов Ж. Зависимость эффективности солнечных панелей от угла установления// Молодой ученый, 2020, 17(307), р. 4-8.
18. Юлдашева Н., Носиров М., Матбабаева С. Моделирование физических процессов на основе Mobile Basic // Universum: Технические науки, № 11(80), 2020, с. 32-35.
19. Юлдашева Н., Алиев Р., Носиров М. Қуёш элементларини такомиллаштиришда наноплазмоника роли // Машинасозлик илмий хабарномаси, 2018, №2, 55-59 б.
20. Зайнобиддинов С., Юлдашева Н., Носиров М. Фотоэлементлар самарадорлигини оширишда металл нанозарралардан фотоэмиссиянинг роли. “Иқтисодий тармоқлари ва ижтимоий соҳанинг энергия самарадорлигини оширишга қаратилган автоматлаштириш ва энергетика муаммоларни ечишда илғор инновацион технологиялар ва таълимнинг ўрни” мавзусида Халқаро илмий-амалий анжуман материаллари, НамМТИ, 2021, 428-431 б.
21. Носиров М., Юлдашева Н., Матбобоева С., Мирзакаримова М. Қуёш элементларининг самарадорлигини оширишда наноплазмониканинг роли “Energetika sohasini rivojlantirishda muqobil energiya manbalarining roli” mavzusida resp. ilm-amal. konferensiya materiallari, NamMQI, 2022, 131-133 б.
22. Носиров М., Юлдашева Н., Хакимов А., Матбобоева С., Мирзакаримова М. Наноплазмоника асосида қуёш элементларининг самарадорлигини ошириш “Янги турдаги муқобил энергия манбаларидан фойдаланишнинг инновацион ечимлари ва улардан фойдаланишда энерготежамкор қурилмаларни қўллаш” республика илмий ва илмий-техник анжуман материаллари., АндМИ, 2022, 290-292 б.

23. Носиров М., Юлдашева Н., Матбобоева С., Мирзакаримова М. Қуёш элементларининг самарадорлигини оширишда наноплазманиканинг роли “Fotonika muammolari va rivojlanish istiqbollari” respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari, UrDU, 2022, 127-129 b.
24. Носиров М.З., Юлдашева Н.М., Матбобоева С.Д. Диэлектрические функции металлов, предназначенных для наноплазмоники. Материалы III - международная научная конференция НПМФ-2022 “Наноструктурные полупроводниковые материалы в фотоэнергетике”, Ташкент, 2022, с. 120-123.
25. Yuldasheva N., Matboboeva S., Nosirov M. Kvant o‘radagi elektron uchun Shredinger tenglamasining sonli yechimi. ”Yarimo‘tkazgichlar, nanomateriallar va fotoenergetikaning dolzarb muammolari” Respublika ilmiy-amaliy anjumani Urganch, 9-10 – dekabr, 2022 yil, 123-126 b.
26. Nosirov M., Yuldasheva N., Matboboeva S. Nanoplazmonika uchun metallarning dielektrik funksiyalari, O‘zR Adliya vazirligi huzuridagi Intellektual mulk agentligi, guvohnoma № DGU 17752, 2022.
27. Nosirov M., Yuldasheva N. Metall nanozarralardan fotoemissiya kesimi, O‘zR Adliya vazirligi huzuridagi Intellektual mulk agentligi, guvohnoma № DGU 17966, 2022.
28. Nosirov M., Yuldasheva N., Matboboeva S., Qo‘chqarova M. “Shredinger tenglamasi”, O‘zR Adliya vazirligi huzuridagi Intellektual mulk agentligi, guvohnoma № DGU 20866, 2022.

Avtoreferat O`zbekiston respublikasi “Usmon Nosir media” nashriyotida tahrirdan o`tkazildi va o`zbek, rus, ingliz tillaridagi matnlari mosligi tekshirildi (30.05.2023 y. №05).

Bosishga ruxcat etildi __.__.2023y.
Bichimi 60X84 1/16, “Times New Roman”
Garniturada raqamli bosma usulida bosildi.
Shartli bosma tobog‘i 3. Adadi: 80. Buyurtma: № 48
NamDU bosmaxonasida chop etildi
Namangan shahri, Uychi ko‘chasi, 316-uy.

