

**ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҚОШИДАГИ
ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАР ФИЗИКАСИ ВА МИКРОЭЛЕКТРОНИКА
ИЛМИЙ-ТАДҚИҚОТ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ФАЛСАФА
ДОКТОРИ ИЛМИЙ ДАРАЖАСИНИ БЕРУВЧИ
PhD.30.08.2018. FM/T.01.12 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

АНДИЖОН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

АЛИЕВА ЖАМИЛА РАЙИМЖОНОВНА

**КРЕМНИЙДА $3d$ ЎТИШ ВА I, III-V ГУРУҲ ЭЛЕМЕНТЛАРИ
АТОМЛАРИНИНГ ДИФФУЗИЯ ПАРАМЕТРЛАРИ**

01.04.10 – “Яримўтказгичлар физикаси”

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2019

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

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

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

Алиева Жамила Райимжоновна Кремнийда $3d$ ўтиш ва I, III-V гуруҳ элементлари атомларининг диффузия параметрлари	3
Алиева Жамила Райимжоновна Диффузионные параметры атомов $3d$ переходных и I, III-V групп элементов в кремнии	21
Alieva Jamila Rayimjonovna Diffusion parameters of atoms of $3d$ transient and I, III-V groups elements in Silicon.	37
Эълон қилинган ишлар рўйхати Список опубликованных работ List of published works	41

**ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҚОШИДАГИ
ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАР ФИЗИКАСИ ВА МИКРОЭЛЕКТРОНИКА
ИЛМИЙ ТАДҚИҚОТ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ФАЛСАФА
ДОКТОРИ ИЛМИЙ ДАРАЖАСИНИ БЕРУВЧИ
PhD.30.08.2018. FM/T.01.12 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

АНДИЖОН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

АЛИЕВА ЖАМИЛА РАЙИМЖОНОВНА

**КРЕМНИЙДА $3d$ ЎТИШ ВА I, III-V ГУРУҲ ЭЛЕМЕНТЛАРИ
АТОМЛАРИНИНГ ДИФФУЗИЯ ПАРАМЕТРЛАРИ**

01.04.10 – “Яримўтказгичлар физикаси”

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2019

Докторлик диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2019.1.PhD/FM77 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Андижон давлат университетида бажарилган.

Диссертация автореферати икки тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб - саҳифасида (ispm.uz) ва «ZiyoNet» ахборот-таълим порталида (www.ziyo.net.uz) манзилларига жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Носиров Мурод Закирович

физика-математика фанлари номзоди, доцент

Расмий оппонентлар:

Абдурахманов Кахар Паттахович

физика-математика фанлари доктори, профессор

Зикриллаев Нурилла Фатхуллаевич

физика-математика фанлари доктори, профессор

Етакчи ташкилот:

Наманган муҳандислик қурилиш институти

Диссертация ҳимояси Ўзбекистон Миллий университети қошидаги Яримўтказгичлар физикаси ва микроэлектроника илмий тадқиқот-институти ҳузуридаги фалсафа доктори илмий даражасини берувчи PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 рақамли илмий кенгашнинг 2019 йил «___» _____ соат ___ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100057, Ўзбекистон, Тошкент шаҳри, Янги Олмазор кўчаси, 20-уй. Тел.: (+99871) 248-79-94; факс: (+99871) 248-79-92; e-mail: info@ispm.uz), ЎзМУ қошидаги ЯФМ ИТИ мажлислар зали).

Диссертация билан Ахборот технологияларини жорий этиш бўлимида танишиш мумкин.

(___ рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 100057, Ўзбекистон, Тошкент шаҳри, Янги Олмазор кўчаси, 20-уй. Тел.: (+99871) 248-79-59; e-mail: info@ispm.uz),

Диссертация автореферати 2019 йил «___» _____ да тарқатилди.

(2019 йил «___» _____ даги рақамли реестр баённомаси)

Ш.Б. Утамурадова

Фалсафа доктори илмий даражасини берувчи

Илмий кенгаш раиси, ф.-м.ф.д., профессор

С.С. Насриддинов

Фалсафа доктори илмий даражасини берувчи

Илмий кенгаш котиби т.ф.д., доцент

А.Т. Мамадалимов

Фалсафа доктори илмий даражасини Илмий

кенгаш қошидаги илмий семинар раиси,

ф.-м.ф.д., профессор, академик

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Жаҳонда ҳозирги кунда яримўтказгичлар микроэлектроникасининг замонавий ривожланиш анъаналарида, интеграл микросхемалар ўлчамларининг микрометрдан субмикрон ва нанометрга ўтиши кузатилмоқда. Электрон тузилмалар элементларининг вертикал ўлчамларини камайтиришга аввало киришма атомлар диффузияси ҳароратини ва технологик жараёнларнинг давомийлигини камайтириш орқали эришилади. Бу ўз навбатида анъанавий киришма атомларининг кремнийга диффузияланишида мақсадли тадқиқотларнинг долзарблигини тасдиқловчи ўзгача жиҳатларга олиб келади. Кремнийда турли, шу жумладан, ноанъанавий киришма атомларининг диффузия параметрларини аниқлаш муҳим амалий вазифалардан биридир. Мазкур вазифаларнинг ҳал этилиши юқори самарадорликка эга ва кенг функционал аҳамиятга молик *p-n*-ўтишли асбобларни ишлаб чиқариш имкониятини оширади. Бунда киришма атомларининг диффузия параметрларини аниқлашнинг кўпқаражатли экспериментал аниқлаш усулларига муқобил бўлган компьютерда дастурий ҳисоблаш усулини кремнийдаги диффузия жараёнларига жорий этиш имкониятларидан фойдаланиш муҳим вазифалардан бўлиб келмоқда.

Бугунги кунда жаҳонда кремний негизида юқори самарали тузилмалар ишлаб чиқаришга йўналтирилган мақсадли илмий тадқиқотларни, жумладан: кремнийда атомлар диффузиясига тегишли тажриба натижаларининг классификациясини ишлаб чиқиш ва диффузия жараёнини моделлаштирувчи энг кичик квадратлар тадқиқот усулини ишлаб чиқиш; кремнийда кимёвий элементлар даврий жадвалининг турли I, III-V гуруҳ элементлари атомларининг асосий диффузия параметрларини мавжуд эмпирик маълумотларга таянган ҳолда олдиндан ишончли аниқлаш; $3d$ ўтиш элементлари атомларининг асосий диффузия параметрларини уларнинг физикавий-кимёвий кўрсаткичларига боғлиқлигини аниқлаш муҳим вазифалардан ҳисобланади.

Мамлакатимизда илм-фан соҳасидаги устувор йўналишларда, жумладан, яримўтказгичли кремний асосида анъанавий диффузия технологияларини жорий этиш орқали юқори самарали асбоблар яратиш бўйича муҳим натижаларга эришилди. Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегиясига кўра, илмий-тадқиқот ва инновация фаолиятини ривожлантириш, илмий ва инновация ютуқларини амалиётга жорий этишнинг самарали механизмларини яратиш масалалари, жумладан, кремний негизида юқори самарали тузилмалар олиш мақсадида турли киришма атомларининг диффузия параметрларини ишончли аниқлаш усуллари тадқиқ қилиш катта аҳамиятга эга.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги Фармони, 2017 йил 13 февралдаги ПҚ-2772-сонли «2017-2021 йилларда Электротехника саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари тўғрисида»ги ва 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сонли «Фанлар академияси фаолияти, илмий тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чоратадбирлари тўғрисида»ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига боғлиқлиги. Тадқиқот иши Республика фан ва технологиялар тараққиётининг 2012-2020 йилларга мўлжалланган “III. Энергетика, энергиятежамкорлик, транспорт, машина ва асбобсозлик; замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника ва электрон асбобсозликни ривожлантириш” устувор йўналишига мос илмий дастурлар доирасида бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Яримўтказгич материалларда, хусусан, кремнийда киришма атомлари диффузиясини ўрганиш бўйича фундаментал ва амалий тадқиқотлар жаҳондаги қатор ривожланган давлатлар илмий тадқиқот мусасаларида ва университетларида олиб борилмоқда. Жумладан, турли гуруҳ атомларининг кремнийда диффузиясини тадқиқ этиш билан йирик олимлар Ж.Волкер (АҚШ), Б.И.Болтакс (РФ), Д.Фишер (АҚШ) ва улар томонидан шакллантирилган илмий мактаблар илмий тадқиқотлар олиб бормоқдалар.

Кремнийда турли кимёвий элементларнинг диффузиясини ўрганиш бўйича жаҳонда жамланган илмий маълумотлар базасига Ўзбекистонлик олимлар академиклар М.С.Юнусов, Р.А.Муминов, М.Бахадирхонов, С.Зайнабидинов, А.Т.Мамадолимов ва профессорлар К.П.Абдурахманов, Н.Зикриллаев, Х.Далиев, Х.Илиев, Ш.Утамурадовалар ўзларининг муносиб ҳиссаларини қўшганлар. Жумладан, чуқур энергетик сатҳлар, кўпзарядли комплекслар, наноўлчамли ички ва сиртий структуралар ҳосил қилувчи турли киришма атомларининг кремнийда диффузия жараёнларини, шунингдек, улар натижасида кремнийда кузатиладиган аномал фото-, термо-, тензо- ва радиацион сезгирлик ҳодисаларини ўрганиш борасида катта илмий аҳамиятга молик ютуқларга эришилган.

Яримўтказгичлар ҳажмида ножинсликлар мавжуд бўлган муҳит учун диффузия жараёнларининг Фик қонунлари асосида математик моделлари Д.Фишер, Р.Т.П.Уиппл, Т.Судзуоки ва М.Смолуховский томонидан ишлаб

чиқилган. Бундай назарий моделлар ва юқори аниқликка эга бўлган замонавий тажрибавий усуллар ёрдамида кремнийда диффузия жараёнларини тадқиқ этиш кенг миқёсда олиб борилмоқда.

Бироқ, тадқиқотларда энг кичик квадратлар усули анъанавий тарзда айнан бирор атомларнинг кремнийдаги диффузия параметрларини аниқлашда қўлланилган. Даврий жадвалнинг аниқ бир қатори ёки гуруҳидаги атомларнинг диффузия параметрларини уларнинг физик-кимёвий кўрсаткичларини эътиборга олган ҳолда яхлит ва компьютерда ҳисоблаш тадқиқ этилмаган ва у шу куннинг долзарб вазифаси ҳисобланади.

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган олий таълим муассасасидаги илмий тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация иши Андижон давлат университети илмий тадқиқот ишлари режасининг ОТ-Ф-2-28. “Легирланган кремний сирти ва ҳажмидаги квант ўлчамли эффектлар ҳамда уларнинг *p-n*-структуралардаги заряд ташувчилар фотогенерация ва рекомбинация жараёнларига таъсири” (2012-2017 йй.) мавзусидаги фундаментал тадқиқот лойиҳаси доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади кремнийда кимёвий элементлар даврий системасининг I, III-V гуруҳ ва *3d* ўтиш элементларининг киришма атомлари диффузиясининг асосий параметрларининг эмпирик маълумотларни ва энг кичик квадратлар усули ёрдамида қайта ишлаш билан аниқлашдан иборат.

Белгиланган вазифалар қуйидагилардан иборат:

кремнийда атомлар диффузиясига тегишли тажриба натижаларининг классификациясини ишлаб чиқиш;

кремнийда атомлар диффузияси жараёнини моделлаштирувчи энг кичик квадратлар тадқиқот усулини ишлаб чиқиш;

кремнийда *3d* ўтиш элементлари атомларининг диффузия механизмларини энг кичик квадратлар усули орқали тадқиқ этиш;

кремнийда I, III ва V гуруҳ элементлари атомларининг диффузия механизмларини энг кичик квадратлар усули орқали тадқиқ этиш;

кремнийда IV гуруҳ элементлари атомларининг диффузия механизмларини энг кичик квадратлар усули орқали тадқиқ этиш;

поликристалл кремнийда атомлар диффузияси механизмларини энг кичик квадратлар усули орқали тадқиқ этиш.

Тадқиқотнинг объекти монокристалл ва поликристалл кремний пластиналари ва уларга диффузияланган I, III-V гуруҳ ва *3d* ўтиш элементлари атомларининг диффузия параметрларидан иборат.

Тадқиқотнинг предмети монокристалл ва поликристалл кремний пластиналари ва уларга диффузияланган I, III-V гуруҳ ва *3d* ўтиш элементлари

атомларининг асосий диффузия параметрларини эмпирик маълумотлардан ва энг кичик квадратлар усулидан фойдаланиб аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг усуллари. Ишда энг кичик квадратлар усулидан ва эмпирик маълумотлардан фойдаланган ҳолда монокристалл ва поликристалл кремний пластиналаридаги диффузия параметрлари аниқланган. Пластиналарга термик ишлов бериш ва диффузиялаш каби технологик усуллардан ҳамда сиртнинг киришмавий таркибини аниқлашда микроморфологик, электрон микроскоп ва рентген таҳлили усуллари қўлланилган.

Натижаларнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

Илк бор кимёвий элементлар даврий жадвали атомларининг кремнийда диффузия жараёнига тегишли диффузия коэффициентлари, фаоллашиш энергиялари атомларнинг тартиб рақамларига, кристал панжаранинг боғланиш электронлар сонига мувофиқлиги ва ковалент радиусларига боғлиқлиги тажриба натижаларининг эмпирик ифодалари ишлаб чиқилган;

кремнийда атомлар диффузиясининг макроскопик назарияси, кристаллдаги тузилиш нуқсонлари, уларнинг термодинамикаси, диффузия жараёнлари кинетикасини тавсифловчи матн, жадвал, график ва диаграммаларни яратувчи “Visual Basic-6,0” дастури асосида ЭҲМ учун дастурий маҳсулот кўринишида энг кичик квадратлар тадқиқот усули ишлаб чиқилган;

кремнийда диффузияланувчи $3d$ элементлари атомларининг асосий диффузия параметрлари $D_0(x)$ ва $E(x)$ нинг қийматларини атомларнинг ($Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co$ ва Ni) тартиб рақами ва массалари ортиб бориши билан камайиши энг кичик квадратлар усули орқали аниқланган;

илк бор даврий жадвалнинг I, III-V гуруҳларига мансуб ҳозиргача ўрганилмаган 12 та атомларнинг кремнийда диффузия коэффициенти ва фаоллашиш энергияси қийматлари энг кичик квадратлар усули орқали аниқланган;

бор (B) атомларининг поликристалл кремнийга термик диффузияланиш жараёнида кристал доналарда ва донадорлик чегара соҳаларида турлича диффузия коэффициентларига эга бўлиши туфайли кристалл бўйлаб заряд ташувчилар ҳаракатчанлигининг ўртача киришма концентрациясига боғлиқлигининг номонотон ўзгариши аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

кремнийда кимёвий элементлар даврий жадвалининг I, III-V гуруҳ ва $3d$ ўтиш элементлари учун алоҳида умумлашган шаклдаги атомлар диффузиясининг асосий параметрларини аниқлашга имкон берадиган эмпирик қонуниятлар ёрдамида турли киришма атомлари учун аниқланган диффузия коэффициенти ва атомларнинг фаоллашиш энергиясининг қийматлари аксарият

холларда экспериментал натижаларга қониқарли даражада мос келиши тасдиқланган;

даврий жадвалнинг амалий ўрганилмаган I, III-V гуруҳларига мансуб 12 та атомларнинг кремнийда диффузия коэффициентлари ва фаоллашиш энергиялари қийматлари аниқланган;

поликристал кремнийда заряд ташувчилар ҳаракатчанлигининг диффузияланган киришмалар концентрациясига боғлиқ равишда номонотон ўзгариши тажрибавий аниқланган;

кукунли холатдаги кремнийнинг ва ундан олинган поликристалл пластинанинг иссиқлик узатиш коэффициентининг тажрибавий қийматлари аниқланган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти кремнийда кимёвий элементлар даврий жадвалининг I, III-V гуруҳ ва $3d$ ўтиш элементлари учун алоҳида умумлашган шаклдаги киришма атомлари диффузиясининг асосий параметрлари саналган диффузия коэффициентлари ва фаоллашиш энергияларининг атомлар тартиб рақамига, массасига ва орбитал радиусига боғлиқлигининг эмпирик қонуниятларининг ҳамда ҳозиргача ўрганилмаган I, III-V гуруҳларга мансуб 12 та атомларнинг кремнийда диффузия коэффициентлари ва фаоллашиш энергиялари қийматлари аниқланганлигидан иборат.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти кремнийда кимёвий элементлар даврий жадвалининг I, III-V гуруҳ ва $3d$ ўтиш элементлари учун алоҳида умумлашган шаклдаги атомлар диффузиясининг асосий параметрлари диффузия коэффициентлари ва фаоллашиш энергияларини аниқлашга имкон берадиган эмпирик қонуниятлари ўрнатилган. Аниқланган диффузия параметрларидан фойдаланиб, кремнийда турли киришма атомларининг қўлланилиши туфайли олинган $p-n$ -ўтишли тузилмаларнинг хусусиятларини олдиндан баҳолаш имконияти яратилган.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Кремнийда кимёвий элементлар даврий системасининг I, III-V гуруҳ ва $3d$ ўтиш элементларининг киришма атомлари диффузиясининг асосий параметрларини эмпирик усулда аниқлаш асосида:

кремнийда турли гуруҳлар атомларининг диффузия коэффициентлари ва атомлар фаоллашиш энергияларини аниқлаш усулидан ОТ-Ф-2-28 рақамли “Легирланган кремний сирти ва ҳажмидаги квант ўлчамли эффектлар ҳамда уларнинг $p-n$ -структуралардаги заряд ташувчилар фотогенерация ва рекомбинация жараёнларига таъсири” фундаментал лойиҳасида юқори даражада легирланган юпқа қатламлар қалинлигини аниқлашда фойдаланилган (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2018 йил 6 октябрдаги 39-01/04-349-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан

фойдаланиш натижавий кескин *p-n*-ўтишда номувозанатли заряд ташувчиларнинг самарали дрейфининг стимулланиши шартларини аниқлашга имкон берган;

диффузия коэффицентини энг кичик квадратлар усулида аниқлаш натижаларидан “№ БФ3/003 - Киришмали волтаик эффектга асосланган яримўтказгич негизли микро ва наноўлчамли ноанъанавий ва муқобил энергия манбаларини яратиш” фундаментал лойиҳада кремнийга ишқорий металл атомларининг диффузия параметрларини аниқлашда фойдаланилган (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2018 й. 06 октябрдаги 39-01/04-349-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш литий, натрий, калий, цезий каби атомлар диффузия коэффицентини ва фаоллашиш энергиясининг атомлар радиуси ва массасига боғланиш қонуниятини аниқлашга имкон берган;

эмпирик маълумотлар асосида энг кичик квадратлар усулида ҳисобланган атомлар диффузия коэффицентини ва фаоллашиш энергияси қийматларидан лабораторияда олинган тажриба натижалари билан таққослаш мақсадида фойдаланилган (Кимё технология ва металлургия университети (Болгария, София) илмий тадқиқот секторининг 2019 йил 20 майдаги маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш метал ва кремний таркибли метал кристалларида ноанъанавий атомларнинг турли ҳароратли диффузиясини таҳлил этишга имкон берган;

кремнийда атомлар диффузия параметрларини эмпирик аниқлаш бўйича олинган натижалардан яримўтказгичли ва фотовольтаик қурилмалар ишлаб чиқаришда фойдаланилган (“LeXsolar GmbH”, (Дрезден, Германия) илмий ишлаб чиқариш корхонасининг 2019 йил 01 майдаги №-102,MD – сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш яримўтказгичлар физикаси ва қайта тикланувчи энергия манбалари бўйича ишлаб чиқариладиган қурилмаларни такомиллаштиришга имкон берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация ишининг натижалари 5 та халқаро ва 10 та Республика миқёсидаги конференцияларда маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтказилган. Шунингдек, диссертация иши Андижон давлат университетининг 2018 йил 18 октябрдаги (Баённома №3) ва 2019 йил 17 апрельдаги (Баённома №2) илмий семинарларида муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича жами 25 та илмий иш чоп этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 6 та мақола нашр

этилган. 3 та ЭХМ учун дастурий маҳсулотга ЎзР ИМАнинг муаллифлик гувоҳномалари олинган.

Диссертациянинг ҳажми ва тузилиши. Диссертация кириш, тўртта боб, муаллифнинг чоп этилган илмий ишлари рўйхати, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат, 13 та расм ва 13 та жадвалга эга. Диссертация ҳажми 112 саҳифани ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотнинг Республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, мавзу бўйича хорижий илмий тадқиқотлар шарҳи, муаммонинг ўрганилганлик даражаси келтирилган, тадқиқотнинг мақсади, вазифалари, объекти ва предмети тавсифланган, шунингдек, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, олинган натижаларнинг назарий ва амалий аҳамияти, тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши, нашр этилган ишлар ва диссертация тузилиши бўйича маълумотлар берилган.

Диссертациянинг **“Кремнийда легирловчи киришма атомлари диффузияси ва асосий диффузия параметрлари”** деб номланган биринчи бобида яримўтказгичларда, хусусан, кремнийда турли гуруҳларга доир киришма атомларининг диффузиясига тегишли назарий тасаввурлар ва илмий матбуотда нашр этилган тадқиқот натижалари таҳлил этилган. Кремний сиртида ва ҳажмида технологик факторлар таъсирида пайдо бўладиган турли характердаги ножинсликларнинг киришма диффузиясига таъсир этиши асосланган. Турли гуруҳ элементларининг кремнийдаги диффузиясини ифодаловчи экспериментал тадқиқотлар натижалари умумлаштирилган. Киришма атомлар диффузия коэффицентлари ва фаоллашиш энергияларининг турли олимлар томонидан аниқланган қийматларининг мутаносиб эмаслик ҳолатларига урғу берилган. Бундай номуносивликнинг физик ва технологик сабабларини ўрганиш долзарб эканлиги асосланган ҳолда диссертация тадқиқотининг мақсади ва вазифалари шакллантирилган.

Диссертациянинг **“Энг кичик квадратлар усули ёрдамида кремнийда атомларнинг диффузия параметрларини аниқлаш”** деб номланган иккинчи бобида энг кичик квадратлар усули ва тажриба натижаларини илмий таҳлил этишда компьютерда моделлаштириш технологиясидан фойдаланишнинг мақсадга мувофиқлиги асосланган.

Агар бирор физик катталиқ y бошқа катталиқ x га боғлиқ бўлса, бу боғланишни x нинг турли қийматлари учун y нинг қийматини ўлчаш йўли

билан ўрганиш мумкин. Ўлчаш натижасида қуйидаги қийматлар қатори аниқланади: $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n$; $y_1, y_2, \dots, y_i, \dots, y_n$.

Тажиба натижаларига кўра $y=f(x)$ функция кўринишидаги графикни олиш мумкин. График кўринишидаги эгри чизик боғланиш функцияси $f(x)$ нинг кўриниши тўғрисида тасаввур ҳосил қилади. Лекин, функциянинг аниқ шаклидаги ўзгарувчилар олдидаги пропорционаллик коэффициентлари номаълумлигича қолади. Бундай ҳолатда энг кичик квадратлар усулини қўллаш мазкур коэффициентлар қийматларини осон аниқлашга имкон беради.

Тажибавий нуқталар одатда узлуксиз чизик устига аниқ тушмайди. Моҳиятан энг кичик квадратлар методи нуқталарнинг чизикдан оғиши квадратларининг йиғиндиси, яъни $[y_i - f(x_i)]^2$ нинг энг кичик бўлишини талаб этади. Амалиётда бу метод кўпроқ ўрганилаётган боғланиш чизикли бўлган ҳолда, яъни $y = kx$ ёки $y = a + bx$ бўлганда қўлланилади.

Агар тажибавий нуқталар қуйидаги ифодани қониқтирса:

$$y = a + bx, \quad (1)$$

x_i, y_i ларнинг мавжуд қийматларидан фойдаланиб, a ва b коэффициентларнинг энг яқин қийматларини топиш мумкин. Ўзгарувчи x_i, y_i ларнинг (1) тенглама билан ифодаланувчи тўғри чизикдан оғишлари квадратлари йиғиндисига тенг бўлган ўртача квадратик хатолик χ^2 учун ифода:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \quad (2)$$

ва χ^2 нинг минимум шартларига мос келадиган a ва b нинг қийматлари топилади:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = 0, \quad \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a - bx_i) = 0.$$

Икки тенгламани биргаликда ечиб, қуйидагиларни оламыз:

$$b = \frac{\sum (x_i - \bar{x}) y_i}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \quad (3)$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x} \quad (4)$$

бу ерда $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i$, $\bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i$.

Бу усул билан ўлчаш натижаларини қайта ишлашда маълумотларни MS Excel жадвалига киритиш ва унинг ёрдамида (1)-(4) тенгламаларга кирувчи барча физик катталикларни ҳисоблаш мумкин. Ундан ташқари ўрганилаётган боғланишларнинг физик механизмини тушуниш учун ҳисоблаш натижаларини график ёки диаграмма шаклида кўрсатиш мумкин. MS Excel дастури нафақат чизикли, балки квадратик, кубик ва бошқа янада мураккаб кўринишдаги

функцияларнинг номаълум коэффициентлари қийматини осонгина ҳисоблашга имкон беради.

Одатда, элементларнинг кремнийдаги диффузия коэффициентлари ҳароратга қуйидаги қонуният асосида боғланган:

$$D = D_0 \exp(-E/kT) \quad (5)$$

бу ерда D_0 – экспонента олди кўпайтмаси, E - фаоллашиш энергияси. D_0 учун турли муаллифлар томонидан атомларнинг даврий жадвалдаги тартиб рақами Z га боғлиқ равишда турлича қийматлар олинган. D_0 нинг қиймати Z га қуйидагича қонун асосида боғланган деб қабул қиламиз:

$$D_0 = A_D Z^3 + B_D Z^2 + C_D Z + D_D.$$

Юқоридаги усулдан фойдаланиб I гуруҳ элементлари учун қуйидаги коэффициентларнинг қийматларини аниқлаймиз: $A_D = -1,46 \cdot 10^{-5}$; $B_D = 1,63 \cdot 10^{-3}$; $C_D = -3,55 \cdot 10^{-2}$; $D_D = 0,14$; $\chi^2 = 2,58 \cdot 10^{-2}$.

Шунингдек атомларнинг фаоллашиш энергияси учун қуйидаги ифодани оламиз:

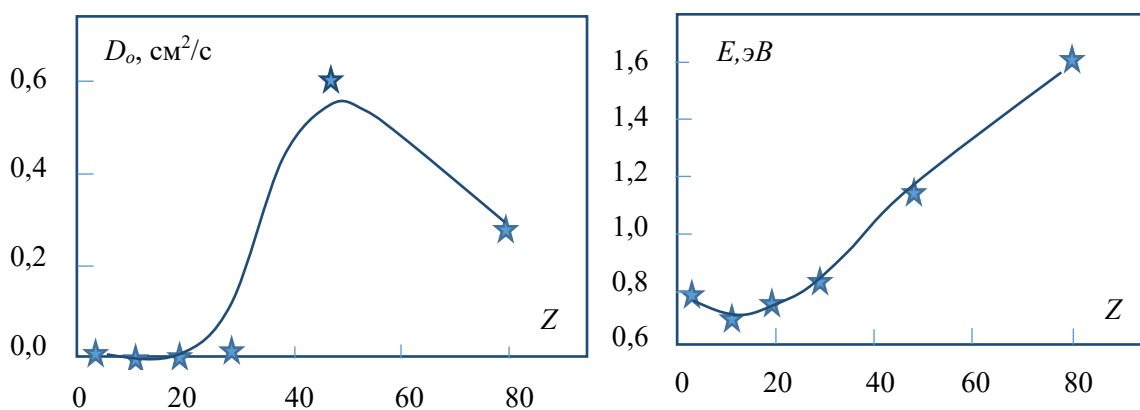
$$E = A_E Z^3 + B_E Z^2 + C_E Z + D_E$$

Унинг учун ҳам коэффициентлар қийматларини топамиз:

$$A_E = -4,86 \cdot 10^{-6}; B_E = 6,98 \cdot 10^{-4}; C_E = -1,48 \cdot 10^{-2}; D_E = 0,81; \chi^2 = 2,18 \cdot 10^{-3}$$

Тажриба маълумотларини ва ҳисоблаш натижаларни MS Excell илова жадвалига жойлаштирамиз.

MS Excell илова дан фойдаланиб, атомлар диффузия коэффициентларининг даврий жадвалдаги тартиб рақамига боғлиқлик графигини олиш мумкин (1-расм).



Расм-1. Кремнийда I гуруҳ элементлари диффузия параметрларининг даврий жадвалдаги тартиб рақамига боғлиқлиги. Нуқталар – тажриба, узлуксиз чизиқ– ҳисоблаш натижалари.

Шунингдек, ушбу бобда кремнийда турли атомлар диффузияси жараёнларини, мавжуд диффузия механизмларини компьютерда моделлаштириш, улар асосида яримўтказгичли тузилмаларни, диод ва бошқа асбобларни моделлаштириш ҳамда уларнинг параметрларини ҳисоблаш

мақсадида дастлаб Visual Basic-6.0 дастурига таянган ҳолда «Кремнийда атомлар диффузияси» деб номланган дастурий маҳсулот, кейинчалик унинг «Кремнийда диффузия механизмлари» ва «Яримўтказгичли диодлар» номли иловалари яратилган.

Диссертациянинг “Кремнийда турли гуруҳ атомларининг диффузия параметрларини аниқлаш” деб номланган учинчи бобда $3d$ ўтиш элементлари атомларининг кремнийда диффузияланиши ва бундай жараёнга электронлар орбитал радиусларининг ва атом массаларининг таъсирини ўрганиш масаласига янгича ёндашилган.

Кремнийда $3d$ ўтиш элементларининг диффузия коэффициентлари учун қуйидаги:

$$D_0 = A_D Z^3 + B_D Z^2 + C_D Z + D_D$$

ва атомлар фаоллашиш энергиялари учун қуйидаги тенгламалар олинди:

$$E = A_E Z^2 + B_E Z + C_E$$

Мазкур тенгламаларга кирган коэффициентларнинг қийматлари юқоридагидек услубда ҳисобланди ва диффузия коэффициентлари тенграмаси учун қуйидаги:

$$A_D = 5,078E-04; B_D = -3,38E-02; C_D = 0,72; D_D = -4,89; \chi^2 = 2,79 \cdot 10^{-2}$$

ҳамда атомлар фаоллашиш энергиялари тенграмаси учун қуйидаги қийматлар топилди:

$$A_E = 8,45E-02; B_E = -4,48; C_E = 59,94; \chi^2 = 3,90E-02$$

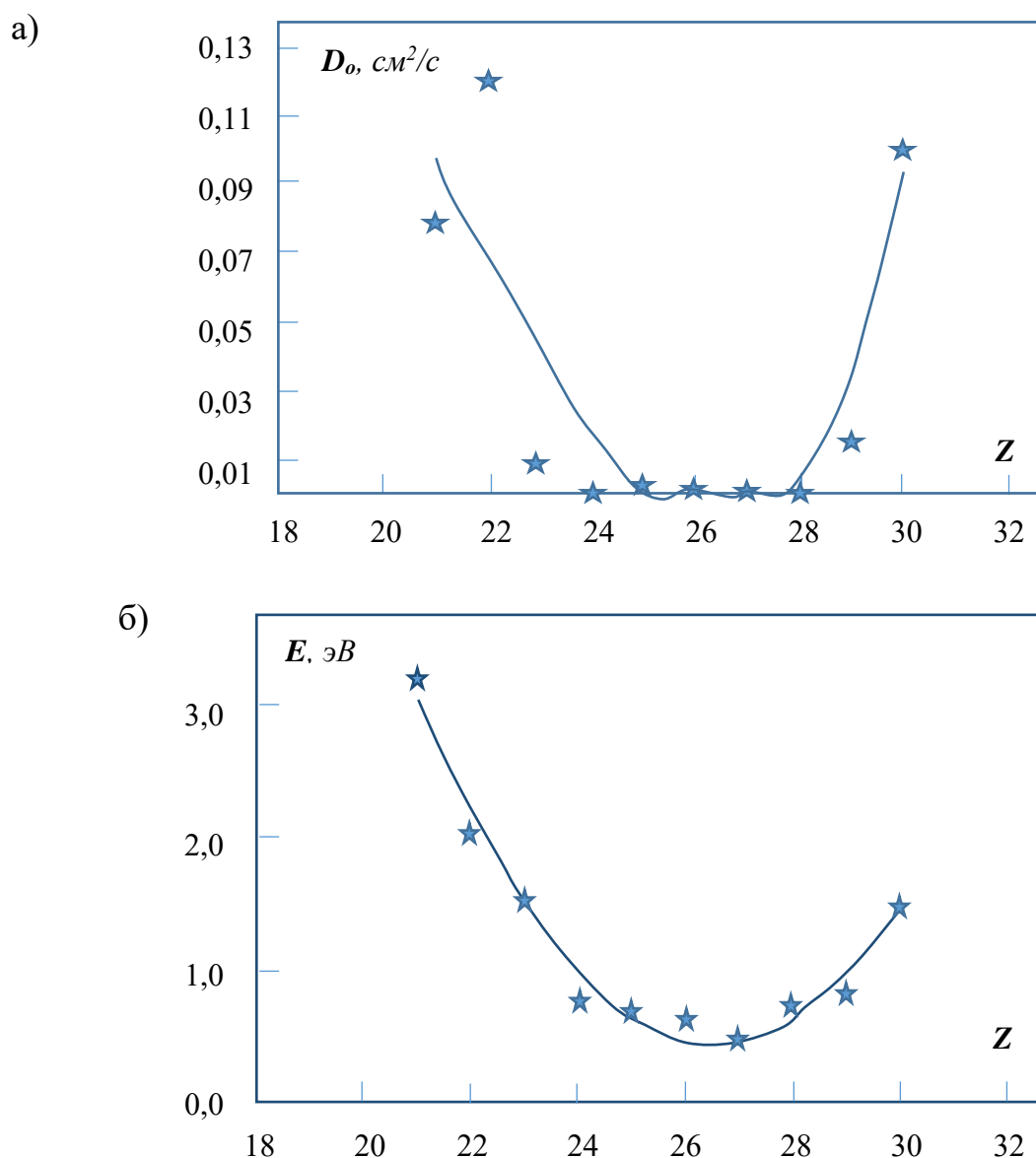
1-жадвал.

Кремнийда $3d$ ўтиш элементлари атомларининг асосий диффузия параметрлари ва электрон ифодалари

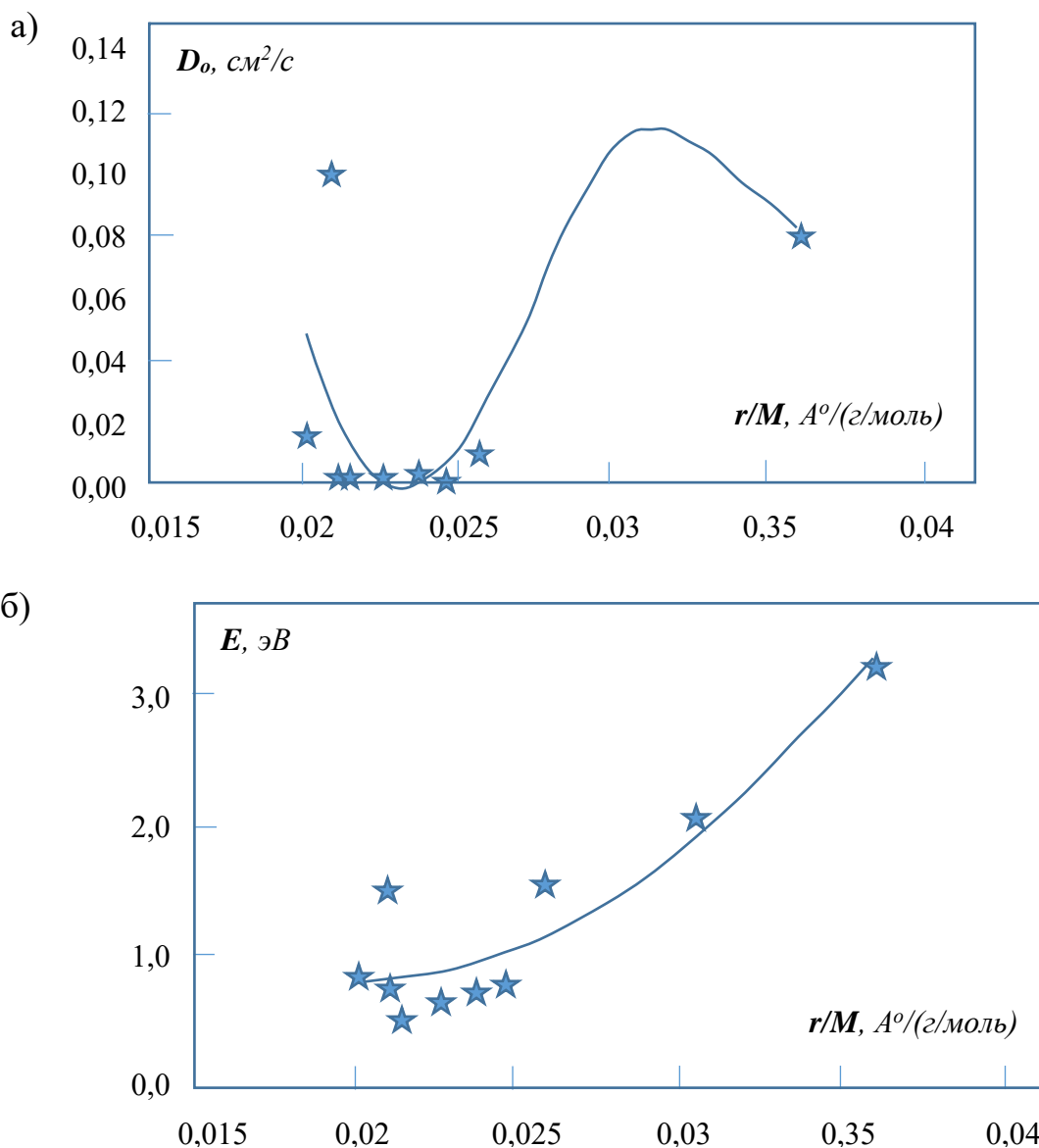
Элемент /гуруҳи	Z	Электрон формуласи	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$		$E, \text{эВ}$	
			Тажриба натижалари	Ҳисоблаш натижалари	Тажриба натижалари	Ҳисоблаш натижалари
<i>Sc/IIIa</i>	21	$\uparrow 3d^1 4s^2$	0,08	8,28E-02	3,2	3,17
<i>Ti/IVa</i>	22	$\uparrow 3d^2 4s^2$	0,12	0,11E-02	2,05	2,17
<i>V/Va</i>	23	$\uparrow 3d^3 4s^2$	0,009	3,27E-02	1,55	1,45
<i>Cr/Via</i>	24	$\uparrow 3d^5 4s^1$	0,00068	5,18E-03	0,79	0,94
<i>Mn/VIIa</i>	25	$\uparrow 3d^5 4s^2$	0,0024	6,5E-03	0,72	0,64
<i>Fe/VIIIa</i>	26	$\uparrow 3d^6 4s^2$	0,0011	2,98E-02	0,66	0,52
<i>Co/VIIIa</i>	27	$\uparrow 3d^7 4s^2$	8,50E-04	4,96E-02	0,5	0,55
<i>Ni/VIIIa</i>	28	$\uparrow 3d^8 4s^2$	0,0006	2,87E-02	0,76	0,72
<i>Cu/IIb</i>	29	$\uparrow 3d^{10} 4s^1$	0,015	2,07E-03	0,86	1,02
<i>Zn/IIb</i>	30	$\uparrow 3d^{10} 4s^1$	0,1	0,1	1,5	1,41

Турли манбалардан олинган тажриба маълумотлари ва ҳисоблаш натижаларини таққослаш мақсадида 1-жадвалга киритилди. Жадвалда атомларнинг ташқи электрон қобиклари учун электрон ифода ҳам келтирилган (ҳар бир қатор учун $\Pi = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$).

Олинган натижалардан фойдаланиб, MS Excell илованинг имкониятларидан келиб чиққан ҳолда, атомлар диффузия коэффициентларининг (2а-расм) ва фаоллашиш энергияларининг (2б-расм) даврий жадвалдаги тартиб рақамига боғлиқлик графигини олиш мумкин.



Расм-2. Кремнийда 3d элементлари диффузия параметрларининг даврий жадвалдаги тартиб рақамига боғлиқлиги. Нукталар – тажриба, узлуксиз чизик – ҳисоблаш натижалари.



Расм-3. $3d$ ўтиш элементлари атомларининг диффузия коэффициентлари (а) ва фаоллашиш энергиялари (б)нинг $x = r/M$ га боғлиқлик графиги: нукталар – тажриба ва узлуксиз чизик – ҳисоблаш натижалари.

Ундан ташқари барча $3d$ ўтиш элементлари учун атомларнинг диффузия коэффициентлари ва фаоллашиш энергияларининг $x=r/M$ га боғлиги мос равишда қуйидаги кўринишга эга бўлади:

$$D_o = A_D + B_D x + C_D/x,$$

$$E = A_E x^2 + B_E x + C_E,$$

бу ерда r ва M мос равишда атомнинг орбитал радиуси ва атом оғирлиги. Ҳисоблаш натижалари ва тажриба маълумотлари 3-расмдаги графикда таққосланган. Графикдан кўринадикки, $3d$ элементлари учун $x = r/M$ ($A^\circ/(g/моль)$) ўзгарувчининг қиймати 0,02 дан 0,37 гача интервалда бўлади. D_o

(x) и $E(x)$ ларнинг қийматлари аксарият атомлар ($Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co$ ва Ni) тартиб рақами ва массаси ортиб бориши билан камаяди.

Шунингдек Cu ва Zn атомлари учун аниқланган қонуниятдан оғиш кузатилади. 2- ва 3-расмлардаги графикларда кўринадиган D_0 ва E ларнинг аниқланган қонуниятдан оғиши улардаги валентликнинг фарқланишидан бўлиши мумкин. Агар 2-жадвалда келтирилган атомларнинг ташқи электрон қобикларидаги электрон ифодаларга эътибор қаратилса, $Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co$ ва Ni атомларининг валентлиги орбитал квант сони 2 га тенг бўлган $3d$ қобикдаги ҳамда Cu ва Zn атомлари учун квант сони 0 га тенг бўлган $4s$ қобикдаги электронлар ҳисобига шаклланади. Бу қобиклар энергия ва орбиталар шакллари билан фарқланади. Диссертацияда таклиф этилган усул ёрдамида кремнийда кимёвий элементлар даврий жадвалининг турли гуруҳ атомлари диффузиясининг умумий жиҳатлари таҳлил этилди. Илмий матбуотда мавжуд турли муаллифларнинг манбаларидаги тажриба маълумотларидан фойдаланиб, даврий жадвалдаги кимёвий элементларнинг тартиб рақами, диффузия коэффициенти D_0 ва фаоллашиш энергияси E га боғлиқлиги ўрганилди.

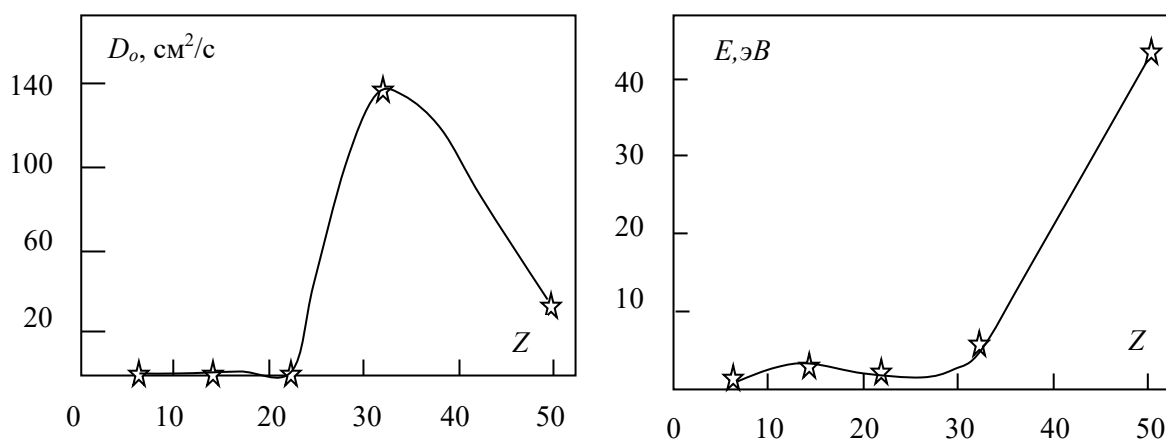
Агар (5) тенгламадаги коэффициент D_0 ва атомларнинг активлашув энергияси E ни кимёвий элемент тартиб рақамига боғлиқлик графиги тажриба натижаларига асосланиб чизилса, боғлиқликнинг бир нечта соҳалари квадрат ёки кубик характерга эга бўлишини тахмин қилиш мумкин. Шу сабабли кимёвий элемент тартиб рақами ва диффузия коэффициентлари орасидаги боғлиқликни ифодалаш мақсадида даврий жадвалнинг IV гуруҳ элементлари диффузиясидаги тажрибавий катталикларни эркин ўзгартириш учун қуйидаги умумлашган ифода олинди:

$$D_0 = A_D Z^3 + B_D Z^2 + C_D Z + D_D \quad (6)$$

Шунингдек, атомларнинг активлашиш энергиялари учун қуйидаги мантиқий умумлашган ифода олинди:

$$E = A_E Z^3 + B_E Z^2 + C_E Z + D_E, \quad (7)$$

Келтирилган коэффицентларнинг (доимий катталикларнинг) қийматларини топиш учун энг кичик квадрат усулидан фойдаланилди ва қуйидагилар аниқланди: (6) ифода учун: $A_D = 150,70$; $B_D = -4298,47$; $C_D = 45946,46$; $D_D = -151363,25$; $\chi^2 = 2,49 \cdot 10^{-8}$; (7) ифода учун: $A_E = 4,16 \cdot 10^{-3}$; $B_E = -0,17$; $C_E = 2,51$; $D_E = -8,95$; $\chi^2 = 6,5 \cdot 10^{-13}$. Тажриба маълумотлари ва ҳисоблаш натижалари график кўринишда келтирилган (Расм-4.).



Расм-4. Кремнийда IV гуруҳ элементлари диффузия параметрларининг киришма атомларининг даврий жадвалдаги тартиб рақамига боғлиқлиги. Нуқталар – тажриба, узлуксиз чизиқ – ҳисоблаш натижалари.

Шундай қилиб, кимёвий элементлар даврий жадвалининг IV гуруҳ атомлар диффузиясининг турли параметрлари ягона нуқтаи назардан таҳлил этилди. Экспонента олди коэффициентини ва атомларнинг активлашиш энергиясининг кимёвий элемент тартиб рақамига боғлиқлигини тасвирлаш учун умумий тенглама олинди. Бу ифодадан фойдаланиб тажрибавий маълумотлари мавжуд бўлмаган кимёвий элементнинг тартиб рақами орқали экспонента олди коэффициентини ва атомларнинг активлашиш энергиясини аниқлаш мумкин. Яратилган усулдан фойдаланиб кремнийда диффузия параметрларини аниқлаш учун турли гуруҳ элементлари бўйича тадқиқотлар ўтказилди ва натижалар умумлаштирилди.

Диссертациянинг “**Поликристал кремнийда атомлар диффузиясининг ўзига хослиги**” деб номланган тўртинчи бобида ножинсли материал сифатида поликристалл кремний танланиб, унда кечадиган атомларнинг хаотик иссиқлик диффузияси жараёнлари билан боғлиқ физик ҳодисалар таҳлил этилган.

Поликристалл материалнинг электр ўтказувчанлиги:

$$\sigma = (q\mu n_0 L \varphi / lkT) \exp(-\varphi/kT), \quad (8)$$

бу ерда L -донадорлик ўлчами, l -донадорлик чегарасидаги ўтказувчан қатлам кенглиги, φ -донадорлик чегарасидаги потенциал барьер баландлиги:

$$\varphi = (qn_s l / \chi) (1 - n_s / 4n_0 l). \quad (9)$$

Хусусан, $\varphi(n_0)$ ва $\mu(n_0)$ боғланишларда донадорлик чегарасидаги заряд ҳолатлар зичлиги n_s муҳим ўрин тутади. Масалан, n_s нинг қиймати 10^{-8} см⁻² дан 10^8 см⁻² гача ўзгарганда, потенциал барьернинг баландлиги $\varphi(n_0)$ унинг тўйиниш соҳасида 0,016 дан 0,16 эВ гача ўзгаради.

Поликристалл кремнийда ЗТлар ҳаракатчанлигининг аномал ўзгариши (5-расм) материалнинг легирлаш даражасининг ортиб бориши билан донадорликлар орасидаги ҳудудда электр ўтказувчанликнинг n -типдан (6-а расм) p -типга (6-б расм) ўзгариши механизми асосида тушунтирилган. Таклиф этилган заряд ташувчилар ҳаракатчанлигининг аномал ўзгаришини ҳисоблаш услуби илгари экспериментал олинган маълумотларни қондирувчи натижалар олишга имкон берди. Бошқача айтганда, бу услуб поликристалл кремний негизида асбобларни тайёрланинг оптимал технологик тартибларини ёхуд уларнинг чиқиш параметрларининг ишончлилигини башорат қилишга хизмат қилади.

ХУЛОСА

1. Кремнийда турли киришма атомларининг асосий диффузия параметрларини атомларнинг физик-кимёвий кўсаткичларига боғланишларини энг кичик квадратлар усулидан фойдаланган ҳолда юқори аниқликда ҳисоблашга асосланган янги тадқиқот методи ишлаб чиқилган.

2. Илк бор кремнийда кимёвий элементлар даврий жадвалининг I, III-V гуруҳ ва $3d$ ўтиш элементлари учун алоҳида умумлашган шаклдаги киришма атомлари диффузиясининг асосий параметрлари саналадиган диффузия коэффициентлари ва фаоллашиш энергияларининг атомлар тартиб рақамига боғлиқлигининг эмпирик қонуниятлари аниқланган.

3. Кремнийда $3d$ ўтиш элементлари учун киришма атомларининг асосий диффузия параметрларининг атомлар массасига ва орбитал радиусига боғланишининг эмпирик қонуниятлари аниқланган.

4. Кремнийда диффузияланувчи $3d$ элементлари учун асосий диффузия параметрлари $D_o(x)$ и $E(x)$ нинг қийматлари аксарият атомлар ($Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co$ ва Ni) тартиб рақами ва массаси ортиб бориши билан камайиши, шунингдек Cu ва Zn атомлари учун диффузия параметрларининг мазкур қонуниятдан оғиши аниқланган ҳамда бундай оғишлар атомлар ташқи (валентлик) электрон хусусиятларининг фарқланиши билан асосланган.

5. Илк бор даврий жадвалнинг I, III-V гуруҳларига мансуб ҳозиргача ўрганилмаган 12 та атомларнинг кремнийда диффузия коэффицентлари ва фаоллашиш энергиялари қийматлари аниқланган.

6. Бор атомларининг поликристалл кремнийга термик диффузияланишида кристал доналарда ва донадорлик чегара соҳаларида турлича диффузия коэффицентларига эга бўлиши туфайли материал бўйлаб заряд ташувчилар ҳаракатчанлигининг ўртача киришма концентрациясига боғлиқлигининг номонотон ўзгариши аниқланган ҳамда бу ҳолат донадорликлар орасидаги худудда электр ўтказувчанликнинг бир турдан қарама-қарши турга алмашилиши механизми билан асосланган.

7. Илк бор кукунли кремний ва ундан пресслаб олинган поликристал пластинанинг иссиқлик узатиш хусусиятлари ҳамда иссиқлик узатиш коэффицентининг тажриба қийматлари аниқланган.

8. Назарий ҳисоблашлар ва натижаларни таҳлил этишга мўлжалланган, илмий ва таълимий аҳамиятга молик ЭҲМ учун дастурлар яратилган: “Кремнийда атомлар диффузияси” (М.г. № DGU 0021, 2015); “Кремнийда диффузия механизмлари” (М.г. № DGU 02507, 2012); “Яримўтказгичли диодлар” (М.г. № DGU 0019, 2015).

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.30.08.2018.FM/Т.01.12
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ
ПРИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМ ИНСТИТУТЕ ФИЗИКИ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ И МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ
ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА**

АНДИЖАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

АЛИЕВА ЖАМИЛА РАЙИМЖОНОВНА

**ДИФФУЗИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ АТОМОВ $3d$ ПЕРЕХОДНЫХ И I, III-V
ГРУПП ЭЛЕМЕНТОВ В КРЕМНИИ**

01.04.10 – Физика полупроводников

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

Ташкент – 2019

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за B2019.1.PhD/FM77.

Диссертация выполнена в Андижанском государственном университете.

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

Научный руководитель: **Носиров Мурод Закирович**
Кандидат физико-математических наук, доцент

Официальные оппоненты: **Абдурахманов Кахар Паттахович**
доктор физико-математических наук, профессор

Зикриллаев Нурилла Фатхуллаевич
доктор физико-математических наук, профессор

Ведущая организация: **Наманганский инженерно строительный институт**

Защита диссертации состоится «__» _____ 2019 года в __ часов на заседании Научного совета по присуждению ученой степени доктора философии PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 при Научно-исследовательском институте физики полупроводников и микроэлектроники Национального университета (Адрес: 100057, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Янги Алмазар, дом 20. Тел: (+99871) 248-79-94, факс (+99871) 248-79-92, e-mail: info@ispm.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Отделе внедрения информационных технологий института (зарегистрирована за № __) по адресу: 100057, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Янги Алмазар, дом 20. Тел: (+99871) 248-79-59.

Автореферат диссертации разослан «__» _____ 2019 года
(реестр протокола рассылки № __ от «__» _____ 2019 г.)

Ш.Б.Утамурадова
председатель Научного совета по присуждению
ученой степени доктора философии,
д.ф.-м.н., профессор

С.С.Насриддинов
ученый секретарь Научного совета по присуждению
ученой степени доктора философии,
д.т.н., доцент

А.Т.Мамадалимов
председатель Научного семинара при Научном
совете по присуждению ученой степени доктора философии,
д.ф.-м.н., профессор, академик

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время в мире традициях развития полупроводниковой микроэлектроники наблюдается переход размеров интегральных микросхем от микрометра на субмикронны и нанометры. Уменьшение вертикальных размеров электронных микроструктур достигается, в первую очередь, за счет снижения температуры диффузии примесных атомов и продолжительности технологических процессов. Это в свою очередь приводит к особенностям процессов диффузии примесных атомов в кремнии, исследования которых является актуальным. Определение основных параметров диффузии различных, в том числе нетрадиционных атомов в кремнии является одним из важных прикладных задач. Решение указанных задач позволяет значительно расширять возможностей производства кремниевых приборов с *p-n*-переходом с высокой эффективностью и функциональностью. При этом остаётся важной задачей разработка методов расчетного определения основных диффузионных параметров различных атомов в кремнии, основанных на использовании существующих эмпирических данных, в качестве альтернативного традиционным дорогостоящим экспериментальным методам.

На данный момент в мире в плане усовершенствования кремниевых структур с *p-n*-переходом считается целесообразным выполнение целевых исследований, в частности, направленных на: разработку классификации экспериментальных данных по диффузии различных атомов в кремнии и метода исследования путем моделирования на основе метода наименьших квадратов процессов диффузии атомов; определение основных диффузионных параметров примесных атомов I, III-V групп элементов используя существующие в научной литературе эмпирических данных; определение основных параметров диффузии атомов *3d* переходных элементов в кремнии в зависимости от их физико-химических показателей а также механизмов их диффузии.

В нашей стране в приоритетных направлениях развития науки, в частности, в создании эффективных приборных структур на основе кремния получены важные результаты. Согласно Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан в вопросах создания эффективных механизмов развития научно-исследовательской и инновационной деятельности, внедрения в практику научных и инновационных достижений уделяется особое внимание, между прочем и исследованию достоверных методов определения диффузионных параметров различных атомов легирующих элементов в кремнии с целью создания высокоэффективных приборных структур.

Данное диссертационное исследование в определённой степени служит выполнению задач, определённых в Постановлении Президента Республики Узбекистан № ПФ-4947 от 7 февраля 2017 года «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан», Указе № УП-2772 от 13

февраля 2017 года «О приоритетных направлениях развития электротехнической промышленности в 2017-2021 годы» и Указе №УП-2789 от 17 февраля 2017 года «О мерах по дальнейшему совершенствованию организации, руководства и финансирования деятельности и научно-исследовательской работы Академии наук», а также других нормативно-правовых актах, касающихся данной деятельности.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Данная исследовательская работа выполнена в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий: «III. Энергетика, энергоресурсосбережение, транспорт, машино- и приборостроение; развитие современной электроники, микроэлектроники, фотоники, электронного приборостроения».

Степень изученности проблемы. Исследования по усовершенствованию диффузионных процессов атомов на кремниевой основе ведутся во многих научно-исследовательских центрах и университетах передовых стран мира. В частности, научным и теоретическим основам диффузии различных легирующих атомов в кремнии посвящены научные исследования Ж.Волкер (США), Б.И.Болтакс (РФ) и Д.Фишер (США).

В базу данных мирового научного общества по диффузии атомов в кремний включены материалы выдающихся узбекских ученых: академиков М.С.Юнусова, Р.А.Муминова, М.Бахадырханова, С.Зайнабидинова, А.Т.Мамадалимова и профессора К.П.Абдурахманова. Также можно отметить активную научную деятельность в этом направлении профессоров Н.Зикриллаева, Х.Далиева, Х.Илиева и Ш.Утамурадовой. Имеют весомый вклад ученые нашей республики в изучении диффузионных процессов различных примесных атомов в кремнии, создающих глубокие энергетические уровни, многозарядные комплексы, внутренние и поверхностные наноразмерные включения, а также в проявлении аномальных фото-, термо-, тензо- и радиационных эффектов в неоднородных легированных различными примесями кремниевых структурах.

Методы моделирования диффузионных процессов в полупроводниках, в частности, неоднородном кремнии предложены Д.Фишером, Р.Т.П.Уипплом, Т.Судзуоки и М.Смолуховским, они основаны на известных законах Фика.

Однако, в исследованиях метод наименьших квадратов использован для определения диффузионных параметров для отдельно взятых атомов в кремнии. Определение диффузионных параметров атомов целого ряда или группы химических элементов путем эмпирического расчета не исследованы. Отсюда вытекает необходимость на дальнейшее исследования по разработке и реализацию нового метода целостного исследования путем эмпирического расчета диффузии атомов различных групп элементов периодической системы в кремнии.

Связь исследования с планами научно-исследовательских работ высшего учебного заведения, где выполняется диссертация. Диссертационная работа выполнена в рамках фундаментального

исследовательского проекта № ОТ-Ф-2-28. «Кванто-размерные эффекты на поверхности и в объёме легированного кремния и их влияние на процессы фотогенерации и рекомбинации носителей зарядов *p-n*-структур» (2012-2016 гг.), включенного в план научно-исследовательских работ Андиганского государственного университета.

Целью исследования является определение основных диффузионных параметров в кремнии примесных атомов *3d* переходных и I, III-V групп элементов периодической системы путем анализа эмпирических данных методом наименьших квадратов.

Задачи исследования:

классификация экспериментальных данных по диффузии атомов в кремнии;

разработка метода исследования процессов диффузии атомов в кремнии путем моделирования на основе метода наименьших квадратов;

исследование механизмов диффузии атомов *3d* переходных элементов методом наименьших квадратов;

исследование механизмов диффузии атомов I, III и V групп элементов методом наименьших квадратов;

исследование механизмов диффузии атомов IV элементов методом наименьших квадратов;

исследование механизмов диффузии атомов в поликристаллическом кремнии методом наименьших квадратов.

Объектом исследования являются пластины моно и поликристаллического кремния, диффузионные параметры примесных атомов, введенных в объем кремния *3d* переходных и I, III-V групп элементов периодической системы.

Предметом исследования является эмпирическое определение основных диффузионных параметров в кремнии *3d* переходных и I, III-V групп элементов периодической системы, основанное на использовании метода наименьших квадратов.

Методы исследования. В работе были применены методы наименьших квадратов для эмпирического определения основных параметров диффузии примесных атомов в моно- и поликристаллическом кремнии. Применены вакуумные технологические методы термической обработки пластин и диффузии примесей, а также экспериментальные методы анализа морфологии поверхности, электронной микроскопии, рентген анализа и компьютерного программного расчета.

Научная новизна исследования:

впервые получены эмпирические уравнения для зависимости коэффициента диффузии и энергии активации различных атомов периодической системы в кремнии от их порядкового номера, электронного соответствия кристалла и радиуса ковалентной связи;

разработан метод исследования в виде программного продукта для ЭВМ с использованием средств “Visual Basic-6,0”, основанный на методе наименьших

квадратов и учитывающий макроскопическую теорию диффузии, дефектов в кристалле, их термодинамики и кинетики, а также позволяющий выражать текстовый, табличный и диаграммный характеристики;

выявлены уменьшение значений основных диффузионных параметров атомов $3d$ переходных элементов (*Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co* и *Ni*) в кремнии с ростом их порядкового номера и массы методом наименьших квадратов;

впервые определены значения коэффициента диффузии и энергии активации 12 ранее не изученных атомов I, III-V групп периодической системы методом наименьших квадратов;

установлено, что разные значения коэффициента диффузии атомов III группы элементов, в частности, бора в зерне и на границах зерен приводит к немонотонному изменению подвижности носителей заряда в поликристаллическом кремнии в зависимости от средней концентрации легирующей примеси и проявление такого аномального явления обосновано физическим механизмом изменения с одного типа электропроводности на противоположный тип в области межзеренных границ.

Практические результаты исследования состоят в следующем:

разработанный эмпирический метод использован для определения коэффициента диффузии D_0 и энергии активации E атомов I, III-V групп и $3d$ элементов периодической системы и получены экспериментально подтвержденные результаты;

впервые определены значения коэффициента диффузии и энергии активации 12 ранее не изученных атомов I, III-V групп периодической системы методом наименьших квадратов;

экспериментально обнаружена немонотонная зависимость подвижности носителей заряда в поликристаллическом кремнии от концентрации термически диффундированных атомов легирующей примеси;

определены экспериментальные значения коэффициента теплопроводности $107,241 \text{ Вт/м} \times \text{град}$ и $78,109 \text{ Вт/м} \times \text{град}$ соответственно для порошкового и поликристаллического кремния.

Достоверность результатов исследования обеспечена использованием известного и многократно апробированного метода наименьших квадратов и полученных ведущими специалистами в области диффузии примесных атомов в кремнии экспериментальных данных, а также применением стандартных лабораторных технологических и измерительных оборудований. Результаты и научные выводы соответствуют общепринятым представлениям и понятиям физики полупроводников.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследования заключается в определении отдельных и обобщенных эмпирических закономерностей зависимости коэффициента диффузии и энергии активации от порядкового номера, массы и орбитального радиуса атомов $3d$ переходных и I, III-V групп элементов периодической системы, а также в определении значений коэффициента диффузии и энергии активации 12 ранее не изученных атомов в кремнии.

Практическая значимость результатов исследования заключается в установлении удовлетворительного соответствия результатов определения коэффициента диффузии и энергии активации для большинства различных примесных атомов в кремнии при помощи новых закономерностей эмпирических зависимостей экспериментальным данным.

Определенные диффузионные параметры примесных атомов в кремнии позволяют предварительно оценить свойства структур с *p-n*-переходом, созданных на их основе.

Внедрение результатов исследования. На основе эмпирического метода определения основных диффузионных параметров в кремнии примесных атомов *3d* переходных и I, III-V групп периодической системы элементов:

новый метод определения коэффициента диффузии и энергии активации атомов различных элементов в кремнии использован в фундаментальном проекте ОТ-Ф-2-28 «Поверхностные и объемные квантово-размерные эффекты в легированном кремнии и их влияние на процессы генерации-рекомбинации и разделения носителей заряда на *p-n*-структурах» для определения толщины сильнолегированных слоев (Справка МВССО РУз №39-01/04-349 от 06.11.2018 г.). Использование научных результатов позволяло определить условия эффективного стимулирования дрейфа неравновесных носителей заряда в резком *p-n*-переходе;

метод определения коэффициента диффузии, основанный на метод наименьших квадратов использован в фундаментальном проекте № БФ3/003 “Разработка полупроводниковых микро и наноразмерных альтернативных источников энергии, основанных на примесного вольтаического эффекта” для определения диффузионных параметров атомов щелочных металлов в кремнии (Справка МВССО РУз №39-01/04-349 от 06.11.2018 г.). Использование научных результатов позволяло определить закономерность зависимости коэффициента диффузии и энергии активации атомов *Li, Na, K, Cs* от массы и орбитального радиуса атомов;

расчетные значения коэффициента диффузии и энергии активации атомов, определенные методом наименьших квадратов использованы для сопоставления с результатами лабораторных опытов (Справка научно-исследовательского сектора Химико-технологического и металлургического университета (София, Болгария) от 20.05.2019 г.). Использование научных результатов позволяло анализировать процессов диффузии нетрадиционных атомов при различных температурах в кристаллах металлов и кремнийсодержащих металлов;

научные и методические данные по эмпирическому определению диффузии атомов в кремнии использованы при производстве полупроводниковых и фотовольтаических устройств (Справка научно-производственного предприятия “LeXsolar GmbH”, (Дрезден, Германия) №-102, MD от 01.05.2019 г.). Использование научных результатов позволяло разработать новые инструменты по физике полупроводников и возобновляемым источникам энергии.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 5 международных и 8 республиканских конференциях.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликованы 25 научные работы, из них 6 статей в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций. Получены авторские свидетельства АИС РУз на 3 программные продукты для ЭВМ.

Объём и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, выводов, списка опубликованных работ автора и списка использованной литературы, содержит 13 рисунков и 13 таблиц. Текст диссертации изложен на 112 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении диссертации обоснованы актуальность и востребованность исследования; определены цель и задачи, а также объект и предмет исследования; указано соответствие приоритетным направлениям развития науки и техники Республики и изложены научная новизна, практические результаты; раскрыты теоретическая и практическая значимость результатов; приведены сведения о внедрении результатов исследования, опубликованных работах и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **“Диффузия атомов легирующих примесей в кремнии и их основные диффузионные параметры”** приводятся литературный обзор и анализ теоретических представлений по диффузии атомов различных групп периодической системы элементов в кремнии. Обосновано воздействие неоднородностей на поверхности и в объеме кремния, возникающих из-за различных технологических факторов, на процессы диффузии примесей, структур, физические основы их работы и основные методы изготовления. Обобщены результаты экспериментальных исследований по диффузии атомов различных групп элементов. Обращено отдельное внимание на взаимное несоответствие значений коэффициента диффузии и энергии активации, определенных различными исследователями. Отмечая актуальность исследования, причины указанного несоответствия данных, диссертантом сформулированы цель и задачи диссертационного исследования.

Во второй главе диссертации **«Определение диффузионных параметров атомов в кремнии при помощи метода наименьших квадратов»** обоснована целесообразность использования метода наименьших квадратов и компьютерного моделирования для научного анализа результатов эксперимента.

Если физическая величина y зависит от другой величины x , такую зависимость можно изучать измерением некоторых значений y для различных значений x . В результате измерений составляется ряд значений: $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots$,

$x_n; y_1, y_2, \dots, y_i, \dots, y_n$.

По результатам такого эксперимента можно построить график функции вида $y=f(x)$. Вид графика позволяет представить вид функции $f(x)$. Но значения коэффициентов перед аргументами остаются неизвестными. В таком случае использование метода наименьших квадратов позволяет легко определить указанные неизвестные коэффициенты.

Суть этого метода заключается в следующем. Экспериментальные точки не совсем точно попадают на линию. Метод наименьших квадратов требует, чтобы сумма квадратов отклонений точек от линии $[y_i - f(x_i)]^2$ была минимальной. На практике этот метод используется для случаев линейной зависимости величин в виде $y = kx$ или $y = a + bx$.

Линейные зависимости достаточно часто встречаются и даже в случае нелинейности зависимости пытаются построить линейный график. Например, если коэффициент преломления оптического слоя n зависит от длины волны λ выражением вида $n=a+b/\lambda^2$, то график построят в виде $n(\lambda^{-2})$.

Если экспериментальные точки удовлетворяют выражению:

$$y = a + bx, \quad (1)$$

пользуясь известными значениями для x_i, y_i необходимо определить наиболее близкие значения коэффициентов a и b . Выражение для среднеквадратичной погрешности переменных x_i, y_i , определяемых выражением (1) принимает вид:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \quad (2)$$

и определяется значением коэффициентов a и b , удовлетворяющих условий минимума χ^2 :

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = 0, \quad \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a - bx_i) = 0.$$

Совместным решением двух уравнений получили:

$$b = \frac{\sum (x_i - \bar{x}) y_i}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \quad (3)$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}, \quad (4)$$

здесь $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i, \quad \bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i$.

Результаты измерений можно ввести в MS Excel таблицу и, используя уравнения (1)-(4), можно вычислить все физические величины. Для физической интерпретации механизмов можно выразить результаты расчета в виде графика или диаграммы. MS Excel программа позволяет легко вычислить коэффициенты не только линейных, но и квадратических и кубических функций.

Например, коэффициент диффузии атомов в кремнии зависит от температуры выражением: $D=D_0 \exp(-E/kT)$, здесь D_0 — предэкспоненциальный коэффициент, E - энергия активации.

Для D_0 использованы материалы исследования различных авторов в зависимости от порядкового номера (Z) в периодической системе.

Предположим, что D_0 зависит от Z выражением: $D_0 = A_D Z^3 + B_D Z^2 + C_D Z + D_D$.

Определяем значения постоянных для примесных атомов I группы элементов: $A_D = -1,46 \cdot 10^{-5}$; $B_D = 1,63 \cdot 10^{-3}$; $C_D = -3,55 \cdot 10^{-2}$; $D_D = 0,14$; $\chi^2 = 2,58 \cdot 10^{-2}$. Уравнение для энергии активации принимает вид: $E = A_E Z^3 + B_E Z^2 + C_E Z + D_E$, значения постоянных для этого уравнения: $A_E = -4,86 \cdot 10^{-6}$; $B_E = 6,98 \cdot 10^{-4}$; $C_E = -1,48 \cdot 10^{-2}$; $D_E = 0,81$; $\chi^2 = 2,18 \cdot 10^{-3}$.

Результаты расчета и экспериментальные данные вводим в таблицу MS Excel приложения и построим график зависимости основных диффузионных параметров примесных атомов I группы элементов в кремнии в зависимости от их порядкового номера (Рис. 1).

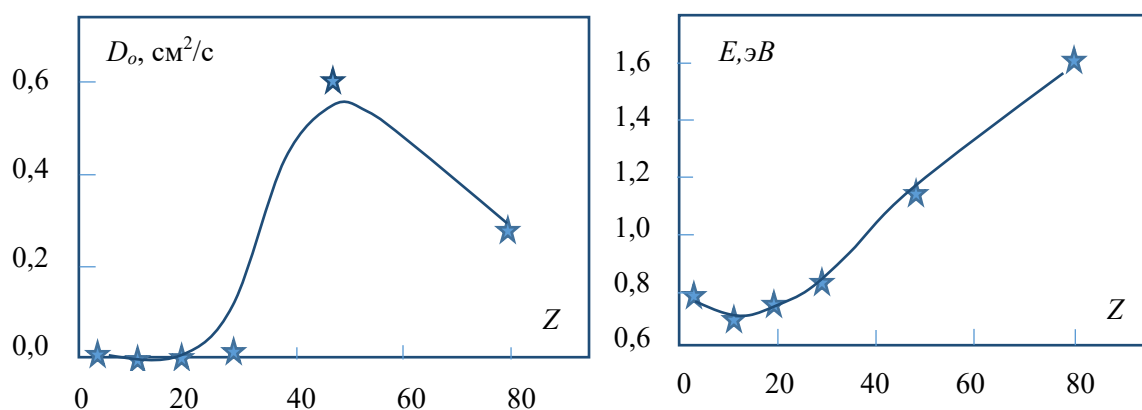


Рис. 1. Зависимость основных диффузионных параметров примесных атомов I группы элементов в кремнии от их порядкового номера в периодической системе: точки – эксперимент, линия – результаты расчета.

С целью осуществления теоретических расчётов и интерпретации их результатов разработаны, имеющие научное и образовательное значения программные продукты для ЭВМ на основе Visual Beysic-6.0: “Диффузия атомов в кремнии”; “Механизмы диффузии в кремнии”; “Полупроводниковые диоды”.

В третьей главе диссертации «**Определение диффузионных параметров атомов различных групп**» рассмотрены вопросы анализа диффузии примесных атомов переходных $3d$ элементов и влияние на диффузионные процессы массы и орбитальных радиусов атомов. Получены выражения для коэффициента диффузии примесных атомов $3d$ переходных элементов в кремнии: $D_0 = A_D Z^3 + B_D Z^2 + C_D Z + D_D$, для энергии активации: $E = A_E Z^3 + B_E Z^2 + C_E Z + D_E$.

Используя предложенный в работе метод наименьших квадратов определены значения постоянных для указанных выражений:

$$A_D = 5,078E-04; B_D = -3,38E-02; C_D = 0,72; D_D = -4,89; \chi^2 = 2,79 \cdot 10^{-2}$$

$$A_E = 8,45E-02; B_E = -4,48; C_E = 59,94; \chi^2 = 3,90E-02$$

Результаты расчета и экспериментальные данные приведены в таблице 1.

Зависимости коэффициента диффузии (Рис. 2а) и энергии активации (Рис. 2б) примесных атомов $3d$ переходных элементов в кремнии от их порядкового

номера в периодической системе элементов приведены на рис. 2.

Таблица 1.

Диффузионные параметры примесных атомов $3d$ переходных элементов в кремнии и электронная формула их внешних оболочек ($\eta = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$)

Элемент /подгруппа	Z	Электронная формула	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$		$E, \text{эВ}$	
			Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет
<i>Sc/IIIa</i>	21	$\eta 3d^1 4s^2$	0,08	8,28E-02	3,2	3,17
<i>Ti/Iva</i>	22	$\eta 3d^2 4s^2$	0,12	0,11E-02	2,05	2,17
<i>V/Va</i>	23	$\eta 3d^3 4s^2$	0,009	3,27E-02	1,55	1,45
<i>Cr/Via</i>	24	$\eta 3d^5 4s^1$	0,00068	5,18E-03	0,79	0,94
<i>Mn/VIIa</i>	25	$\eta 3d^5 4s^2$	0,0024	6,5E-03	0,72	0,64
<i>Fe/VIIIa</i>	26	$\eta 3d^6 4s^2$	0,0011	2,98E-02	0,66	0,52
<i>Co/VIIIa</i>	27	$\eta 3d^7 4s^2$	8,50E-04	4,96E-02	0,5	0,55
<i>Ni/VIIIa</i>	28	$\eta 3d^8 4s^2$	0,0006	2,87E-02	0,76	0,72
<i>Cu/Ib</i>	29	$\eta 3d^{10} 4s^1$	0,015	2,07E-03	0,86	1,02
<i>Zn/IIb</i>	30	$\eta 3d^{10} 4s^1$	0,1	0,1	1,5	1,41

Представляет интерес зависимость коэффициента диффузии (Рис. 3а) и энергии активации (Рис. 3б) примесных атомов $3d$ переходных элементов в кремнии от их массы и орбитального радиуса. Поэтому получены следующие уравнения:

$$D_0 = A_D + B_{DX} + C_D/x,$$

$$E = A_E x^2 + B_E x + C_E,$$

здесь r и M , соответственно орбитальный радиус и масса атома. Результаты расчета и экспериментальные данные приведены на рис. 3.

Значения переменного $x = r/M$ ($\text{А}^\circ/(\text{г/моль})$) для $3d$ элементов изменяется от 0,02 до 0,37. Определены зависимости основных диффузионных параметров D_0 и E от отдельного изменения орбитального радиуса и массы атомов. При этом приведенное уравнение достаточно удовлетворительно описывает экспериментальную зависимость $E(x)$. Для зависимости $D_0(x)$ характерны некоторые отклонения для атомов *Cu* и *Zn*.

Указанные отклонения основных диффузионных параметров (особенно коэффициента диффузии) атомов $3d$ переходных элементов в кремнии по выше проявленным закономерностям можно связать с различием проявления их валентности. Если обратим внимание на электронную формулу атомов (таблица 1) можно заметить, что для атомов *Sc*, *Ti*, *V*, *Cr*, *Mn*, *Fe*, *Co* и *Ni* валентность проявляется за счет электронов $3d$ оболочки с орбитальным квантовым числом 2, а для атомов *Cu* и *Zn* за счет электронов $4s$ оболочки с орбитальным квантовым числом 0. Указанные электронные оболочки различаются как энергией, так и формой орбиты.

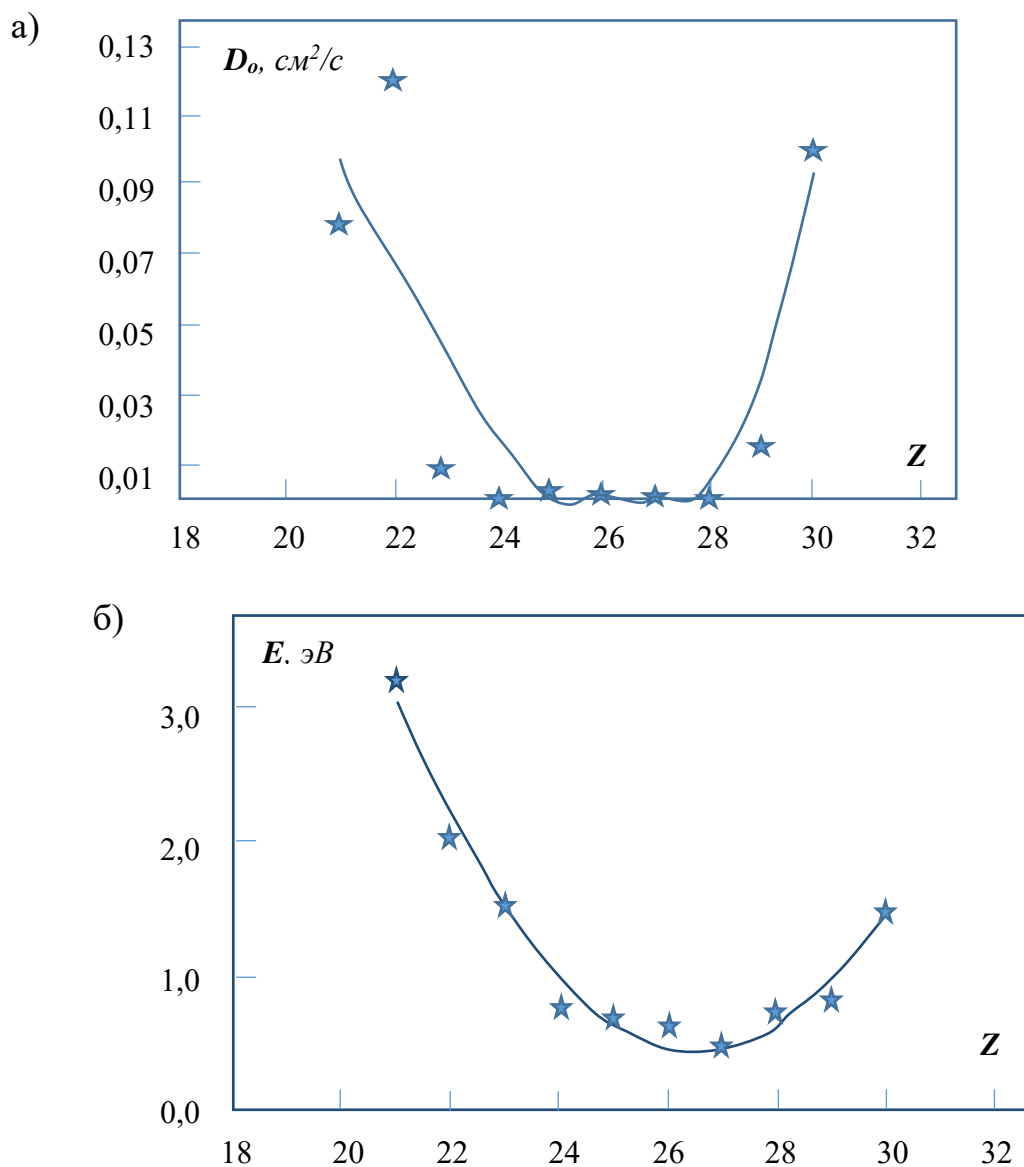


Рис. 2. Зависимость основных диффузионных параметров примесных атомов $3d$ переходных элементов в кремнии от их порядкового номера в периодической системе: точки – эксперимент, линия – расчет.

Проведен анализ общих особенностей диффузии атомов различных групп периодической системы элементов при помощи предложенного в работе метода. Основываясь на экспериментальных данных, полученных различными авторами, изучена взаимосвязь порядкового номера атомов Z , коэффициента диффузии D_0 и энергии активации E различных атомов периодической системы элементов.

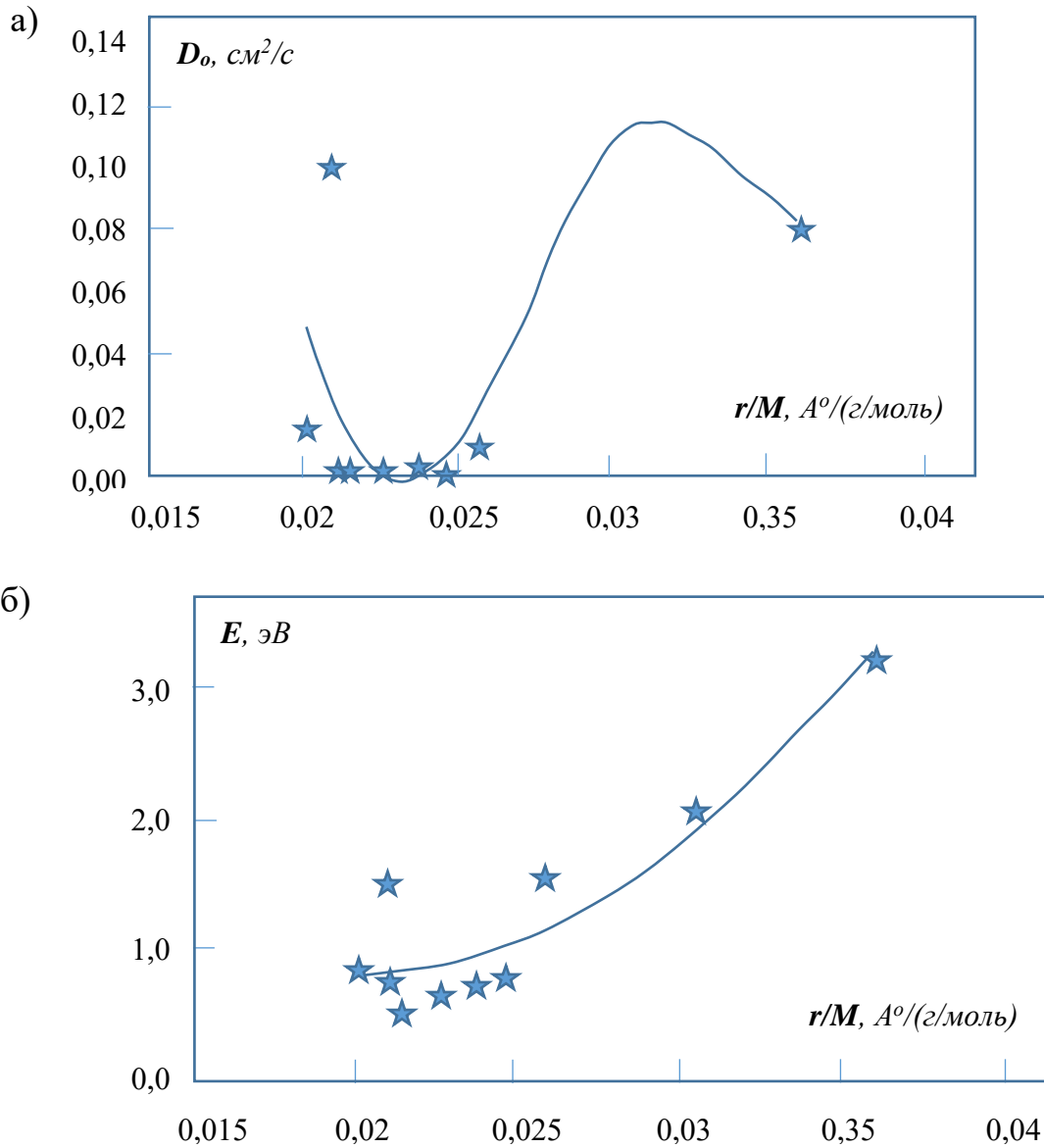


Рис. 3. Зависимость основных диффузионных параметров примесных атомов $3d$ переходных элементов в кремнии от величины $x = r/M$: точки – эксперимент, линия – результаты расчета.

Если построить график зависимости коэффициента диффузии D_0 и энергии активации E для различных атомов периодической системы элементов от порядкового номера атомов Z , основываясь на известные экспериментальные данные, можно предположить, что некоторые части кривой имеют квадратическую и кубическую форму. Поэтому, для атомов IV-группы элементов принято уравнение в виде:

$$D_0 = A_D Z^3 + B_D Z^2 + C_D Z + D_D. \quad (6)$$

Уравнение для энергии активации принимает вид:

$$E = A_E Z^3 + B_E Z^2 + C_E Z + D_E, \quad (7)$$

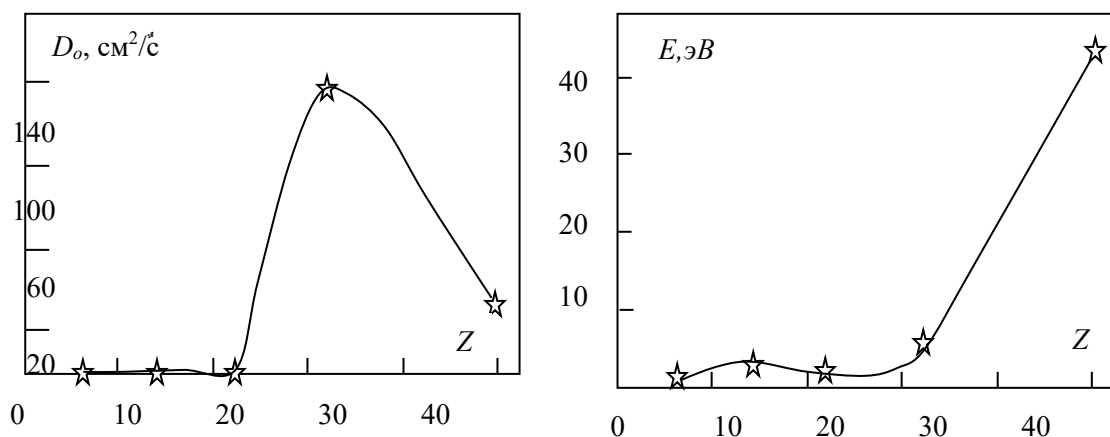


Рис. 4. Зависимость основных диффузионных параметров примесных атомов IV группы элементов в кремнии от их порядкового номера в периодической системе: точки – эксперимент, линия – расчет.

Результаты расчета в сопоставления с известными экспериментальными данными приведены на графике зависимости коэффициента диффузии D_0 и энергии активации E для различных атомов IV группы элементов периодической системы от их порядкового номера Z (рис. 4).

Используя метод наименьших квадратов определены постоянные: для уравнения (6): $A_D = 150,70$; $B_D = -4298,47$; $C_D = 45946,46$; $D_D = -151363,25$; $\chi^2 = 2,49 \cdot 10^{-8}$ и для уравнения (7): $A_E = 4,16 \cdot 10^{-3}$; $B_E = -0,17$; $C_E = 2,51$; $D_E = -8,95$; $\chi^2 = 6,5 \cdot 10^{-13}$.

Таким образом, основные диффузионные параметры атомов IV группы элементов анализированы с единой точки зрения. Получена единая формула для определения зависимости предэкспоненциального коэффициента диффузии и энергии активации от порядкового номера элемента периодической системы. Используя эту формулу и порядковый номер элемента можно определить значения предэкспоненциального коэффициента диффузии и энергии активации атомов, для которых отсутствуют экспериментальные данные. Обобщены данные основных диффузионных параметров атомов различных групп и периодов таблицы химических элементов, определенные методом наименьших квадратов.

В четвёртой главе диссертации «**Особенности диффузии атомов в поликристаллическом кремнии**» в качестве неоднородного кремния выбран поликристаллический кремний (ПК). Выполнен анализ физических процессов, связанных с тепловой диффузией атомов в объеме такого материала.

Электропроводность такого ПК материала описывается выражением:

$$\sigma = (q\mu n_0 L\varphi / lkT) \exp(-\varphi/kT), \quad (8)$$

где L -размер зернистости, l -ширина проводящего слоя на ГЗ, φ -высота потенциального барьера на ГЗ:

$$\varphi = (qn_s l / \chi) (1 - n_s / 4n_o l) . \quad (9)$$

В частности, плотность поверхностных состояний n_s на ГЗ имеет важное значение для выражений $\varphi(n_o)$ и $\mu(n_o)$. Например, при изменении значений n_s от 10^8 см^{-2} до 10^8 см^{-2} высота потенциального барьера $\varphi(n_o)$ в области насыщения растет от 0,016 до 0,16 эВ.

Экспериментально обнаруженное аномальное изменение подвижности НЗ в поликристаллическом кремнии с ростом уровня концентрации диффундированных легирующих атомов объяснено механизмом изменения с одного типа проводимости на противоположное на ГЗ. Предложенный способ вычисления аномального изменения подвижности НЗ позволял получить результатов, удовлетворяющих экспериментальные данные.

Другими словами, данный метод может служить для выбора технологических режимов изготовления полупроводниковых приборов на ПК основе или предварительной оценки их надежности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработан новый метод определения основных диффузионных параметров атомов различных групп элементов в кремнии в зависимости от их физико-химических показателей, заключающийся в использовании метода наименьших квадратов, экспериментальных данных и программного расчета.

2. Впервые определены отдельные и обобщенные эмпирические закономерности зависимостей коэффициента диффузии и энергии активации от порядкового номера примесных атомов $3d$ переходных и I, III-V групп элементов периодической системы в кремнии.

3. Установлены эмпирические закономерности зависимостей коэффициента диффузии и энергии активации от массы и орбитального радиуса атомов $3d$ переходных элементов периодической системы в кремнии.

4. Обнаружены уменьшение значений основных диффузионных параметров для большинства атомов $3d$ элементов ($Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co$ и Ni) в кремнии с ростом их порядкового номера и массы, а также существенное отклонение диффузионных параметров для атомов Cu и Zn от установленной закономерности, связанное с различием механизма проявления их валентности.

5. Впервые определены значения коэффициента диффузии и энергии активации 12 ранее не изученных атомов I, III-V групп периодической системы элементов.

6. Установлено, что разные значения коэффициента диффузии атомов III группы, в частности, бора в зерне и на границах зерен приводит к немонотонному изменению подвижности носителей заряда в поликристаллическом кремнии в зависимости от средней концентрации легирующей примеси и проявление такого аномального явления обосновано физическим механизмом изменения с одного типа на противоположный тип электропроводности в области промежуточных границ зерен.

7. Впервые определены особенности проявления теплопроводности порошкового и прессованного из него поликристаллического кремния, а также экспериментальные значения их коэффициента теплопроводности.

8. Разработаны программные продукты для ЭВМ: “Диффузия атомов в кремнии” (А.с. № DGU 0021, 2015); “Механизмы диффузии в кремнии” (А.с. № DGU 02507, 2012); “Полупроводниковые диоды” (А.с. № DGU 0019, 2015).

**SCIENTIFIC COUNCIL No.PhD.30.08.2018.FM/T. 01.12
ON AWARD OF THE DEGREE OF DOCTOR OF PHILOSOPHY
AT THE SCIENTIFIC RESEARCH INSTITUTE OF SEMICONDUCTORS
PHYSICS AND MICROELECTRONICS UNDER
THE NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN**

ANDIJAN STATE UNIVERSITY

ALIEVA JAMILA RAYIMJONOVNA

**DIFFUSION PARAMETERS OF ATOMS OF $3d$ and I, III-IV GROUPS OF
ELEMENTS IN SILICON**

01.04.10 - Physics of semiconductors

**THE AUTHOR'S ABSTRACT OF THE DISSERTATION OF THE DOCTOR OF
PHILOSOPHY (PhD) PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

TASHKENT – 2019

The theme of the dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences is registered in the Higher certifying commission at the Republic Uzbekistan Cabinet for B2019.1.PhD/FM77

The dissertation is executed at the Andijan state university.

The dissertation author's abstract in three languages (Uzbek, Russian, English (the resume)) is placed on Scientific council web page (ispm.uz) and on an information-educational portal «ZiyoNet» (www.ziyo.net.uz).

The supervisor of studies: **Nosirov Murod Zakirovich**
The candidate of physical and mathematical sciences,
the senior lecturer

Official opponents: **Abdurakhmanov Kahar Pattahovich**
The doctor of physical and mathematical sciences,
Professor

Zikrillaev Nurilla Fathullaevich
The doctor of physical and mathematical sciences,
Professor

The leading organization: **Namangan engineering building institute**

The defense of the doctoral dissertation will take place “__” _____ 2019, at ____ at the meeting of the Scientific Council No. PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 at the Scientific Research Institute of Physics of Semiconductors and Microelectronics under the National University of Uzbekistan (Address: 20 Yangi Olmazor str., 100057 Tashkent city, Uzbekistan. Tel. (+99871) 248-79-94, fax: (+99871) 248-79-92, e-mail: info@ispm.uz, Conference Hall of the SRIPSM under the NUU).

It is possible to familiarize with the dissertation in the information-resource center of Institute of physics of semiconductors and microelectronics of National University of Uzbekistan (it is registered for № ____). The address: 20 Yangi Olmazor str., 100057 Tashkent city, Uzbekistan. Tel.: (+99871) 248-79-59, e-mail: info@ispm.uz.

The dissertation author's abstract is dispatched «__» _____ 2019

(The mailing report № _____ from «__» _____ 2019).

S.B.Utamuradova

Chairman of scientific council
on award of Philosophy doctor,
DSc in physics and mathematics, professor

S.S.Nasriddinov

The Scientific secretary of Scientific council
on award of Philosophy doctor,
DSc in technics, docent

A.T.Mamadlimov

Chairman of a Scientific seminar at Scientific council
on award of Philosophy doctor,
DSc in physics and mathematics, professor, the academician

INTRODUCTION (abstract of PhD dissertation)

The aim of research work is definition by a empirical method of main diffusion parameters of the various atoms of I, III-V groups and the $3d$ elements in silicon.

The object of research are plates non-uniform crystalline and polycrystalline silicon and main diffusion parameters in silicon of the atoms of $3d$ transitive and I, III-V groups of elements of periodic system .

Scientific novelty of research: The program based on use of a method of the least squares, for exact calculation of the basic diffusion parameters of atoms of various groups of elements in silicon depending on various factor sizes is developed;

For the first time the separate and generalized empirical laws of dependences of factor of diffusion and energy of activation from serial number of atoms of $3d$ transitive and I, III-V groups of elements of periodic system in silicon are defined;

Empirical laws of dependences of factor of diffusion and energy of activation from weight and orbital radius of atoms $3d$ transitive elements of periodic system in silicon are defined;

Reduction of values of the basic diffusion parameters for the majority of atoms of $3d$ elements (*Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co* and *Ni*) with their growth of numbers and weights, and also an essential deviation diffusion parameters for atoms *Cu* and *Zn* from the established law distinction of display of their valence are proved;

For the first time values of diffusion factor and energy of activation of earlier not studied 12 atoms of I, III-V groups elements of periodic system are defined;

It is defined that different values of factor of diffusion of III group atoms, in particular, in grain and on grain boundary (GB) leads to anomaly changing of charge carriers mobility in poly-Si depending on average of doping concentration and display of such anomaly phenomenon is proved by changing of conductivity mechanism in GB;

Properties of heat conductivity of the poly-Si plate and powder Si and, in particular, experimental values of factor of heat conductivity for the first time are defined.

Implementation of the research results. On the basis of an empirical method of definition of the basic diffusion parameters in silicon impurity atoms of $3d$ transitive and I, III-V groups of periodic system of elements:

the method of definition of factor of diffusion and energy of atoms activation of various elements in silicon is used in project OT-Φ-2-28 «Superficial and volume quant-dimensional effects in the alloyed silicon and their influence on processes of generation-recombination and division of carriers of a charge on *p-n*-structures» for definition of a thickness of high doped layers (the Inquiry of MHSSE Uz №39-01/04-349 from 11.6.2018). Use of scientific results allowed defining conditions of effective stimulation of drift of no equilibrium charge carriers in sharp *p-n*-junction;

the method of definition of factor of the diffusion, based on a method of the least squares is used in the project № БФ3/003 “Working out semi-conductor micro and nanosize the alternative energy sources based on impurity voltage effect” for definition of diffusion parameters of atoms of alkaline metals in silicon (the Inquiry of MHSSE Uz №39-01/04-349 from 11.6.2018). Use of scientific results allowed defining law of dependence of factor of diffusion and energy of atoms activation of *Li, Na, K, Cs* from weight and orbital radius of atoms;

settlement values of diffusion factor and energy of activation of the atoms, defined by a method of the least squares are used for comparison of laboratory trials results (the Inquiry of research sector of Chemical-technological and metallurgical university (Sofia, Bulgaria) from 5.20.2019). Use of scientific results allowed analyzing processes of diffusion of nonconventional atoms at various temperatures in crystals of metals and siliceous metals;

scientific data by empirical definition of diffusion of atoms in silicon is used by manufacture semiconductor and Photovoltaic devices (the Inquiry of the research-and-production enterprise “LeXsolar GmbH”, (Dresden, Germany) №-102, MD from 5.1.2019). Use of scientific results did allow develop of new tools on the semiconductor physics and renewable energy source.

Structure and volume of dissertation. Dissertation consists of introduction, four chapters, conclusions, list of references, 13 figures and 13 tables. The text of the thesis is printed on 112 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

1. М.З.Носиров, Ж.Алиева. Об аномальной подвижности носителей заряда в некристаллических полупроводниках. // Ўзбекистон физика журнали. – Тошкент, 2002. – № 2. –С. 133-135 (01.00.00 №5).
2. С.Зайнобидинов, М.Носиров, Ж.Алиева. О коэффициентах диффузии $3d$ -элементов в кремнии. // Ўзбекистон физика журнали. – Тошкент, 2003. – №1. – С. 69-71 (01.00.00 №5).
3. J.Alieva, M.Nosirov, E.Mukhtarov The Thermal Conductivity of Solar Cell Wafers Molded from a Powdered Stock. // Applied Solar Energy. USA. 2014, Vol. 50, No. 2, pp. 110–112 (Гелиотехника. – 2014. – №2. – С. 57-59) (01.00.00 №3).
4. Ж.Р.Алиева Дифференциальный анализ эмпирических данных основных диффузионных параметров атомов нетрадиционных примесей в кремнии. // Научный вестник (АГУ), 2019, №1, С. 21-24. (01.00.00 №13)
5. J.Alieva, O.Parpieva, M.Nosirov. Kremniyda I guruh elementlari diffuziyasi // ЎзМУ хабарлари. – Тошкент, 2013. – №2/1. – 198-199 б. (01.00.00 №8)
6. Ж.Р.Алиева. Метод наименьших квадратов на основе “MS Excell” для обработки экспериментальных данных. // Наука и Мир (Международный журнал “Science and World”). – РФ, 2016. – №2. – С. 43-47 (№6. GIF. IF: 0,325)

II бўлим (II часть; part II)

7. Алиева Ж.Р., Носиров М., Абдукаххорова М.А., Аббосова Н. О диффузионных параметрах примесных атомов V группы элементов в кремнии. // Молодой ученый. 2018. – №51 (237). – С. 1-3.
8. Ж.Алиева. Математические модели диффузии примесей в полупроводнике и их роль в электронной технологии // Научный вестник. – Андижан, 2013. – №1. – С. 10-16.
9. Ж.Алиева, М.Носиров Полуэмпирические диффузионные параметры атомов $3d$ переходных элементов в кремнии. // Инженерные решения. Электронный научный журнал. – 2019 – № 2(3). С. 4-7. <https://journaltech.ru/archive/3>
10. Ж.Алиева, М Носиров. “MS Excell” асосида энг кичик квадратлар усули билан физика тажрибалари натижаларининг таҳлили. // Научный вестник: Машиностроение, 2016. – №2. – С. 134-137.

11. Р.Алиев Л.Олимов, Э.Мухтаров, Ж.Алиева. Процесс формовки пластин поли-Si из порошкового сырья и анализ примесного состава его поверхности. // “Физическая инженерия поверхности”. – Украина, 2011. – №4. –С. 55-59.
12. Ж.Алиева, М.Носиров. “MS Excell” асосида энг кичик квадратлар усули билан физика тажрибалари натижаларининг таҳлили. // Физика, математика, информатика, 2016. – №1. – С. 88-95 (13.00.00 №2).
13. M.Nosirov, S.Zaynobiddinov, J.Alieva. Kremniyda atomlar diffuziyasi. Elektron darslik. Mualliflik guvohnomasi № DGU 03102 (2015).
14. М.Носиров, Ж.Алиева. Кремнийда диффузия механизмлари. Муаллифлик гувоҳномаси № DGU 02507 (2012).
15. M.Nosirov, J.Alieva, Yo.Mamatohunov. Yarimo'tkazgichli diodlar. Mualliflik guvohnomasi № DGU 03101 (2015).
16. M.Nosirov and J.Alieva. “Universal calculator” for solving the physical problems // “Global Science and Innovation”. US. Chikcago, 17-18 dec, 2013, pp. 278-282.
17. М.Носиров, Ж.Алиева. Методика изучения теплопроводности монополи- и порошкообразного кремния // Материалы Межд. конф. “Интеграция образовательного пространства с реальным сектором экономики”. – РФ, Новосибирск, 27 февраль-2 март, 2012. – С. 53-55.
18. М.Носиров, Ж.Алиева. Об аномальной подвижности носителей заряда в поли-Si. // “XXI аср фани: муаммолар ва ечимлар” мавзусидаги илмий анжуман материаллари. – Андижон, 14-апрель, 2002. – 14-17 б.
19. М.Носиров, Ж.Алиева. АКТ ёрдамида диффузия ходисасини ўрганиш // “Физика, математика ва информатика фанларининг ўқитишнинг долзарб муаммолари” мавзусидаги илмий анжуман материаллари. – Андижон, 24-апрель, 2012. – 102 б.
20. М.Носиров, Ж.Алиева, О.Парпиева. Кремнийдаги I гуруҳ элементлари диффузияси // Материалы междунар. конф. – Ташкент, ФТИ НПО “Физика солнце» АН РУз, 14-15 ноябрь, 2013. – 75-76 б.
21. M.Nosirov, J.Alieva, S.Pozilova, I.Anorboev. Kremniyda III гуруҳ elementlari diffuziyasi // “Kondensatlangan muhitlar fizikasi va fizika o'qitishnig dolzarb muammolari”. – Namangan, 13-iyun, 2015. –130-132 б.
22. S.Zaynobidinov, M.Nosirov, J.Alieva Kremniyda IV гуруҳ elementlari diffuziyasi // Физиканинг фундаментал ва амалий масалалари. – Тошкент, ФТИ АН РУз, 6-7 ноябрь, 2014. – 52-53 б.
23. Ж.Алиева, М.Насыров, Р.Алиев. Обобщенный анализ диффузионных параметров атомов IV группы периодической системы элементов в кремнии //

Тезисы докл. Респ. конф. “Современн. проблемы физ. конденсир. состояния” - ‘СПФКС-2016’. – Бухара, 2016 г. 12-14 апр. – С. 128-130.

24. Ж.Алиева. Особенности диффузионных параметров атомов $3d$ переходных элементов в кремнии. // Сборник статей международного научно-практического семинара в рамках проекта RENES: Разработка магистерской программы по возобновляемым источникам энергии устойчивой окружающей среды. ГулГУ, Гулистан, 26-28 март, 2019 г. - С. 158-164.

25. Ж.Алиева О диффузионных параметрах нетрадиционных атомов в кремнии. // Материалы Республиканской конференции «Физика возобновляемых источников энергии и устойчивой окружающей среды». КарГУ, Карши, 23-24 апрель 2019 г. - С. 11-14.

Автореферат “Тил ва адабиёт таълими” журнали таҳририятида таҳрирдан ўтказилди ва ўзбек, рус ва инглиз тилларидаги матнларини мослиги текширилди.

Бичими 60x841/16.Рақамли босма усули. Times гарнитураси.
Шартли босма табоғи: 3,75. Адади 100. Буюртма № 78.

Гувоҳнома reestr № 10-3719
“Тошкент кимё технология институти” босмахонасида чоп этилган.
Босмахона манзили: 100011, Тошкент ш., Навоий кўчаси, 32-уй.

