



Ge_{1-x}Sn_x yarim o'tkazgichli qattiq qorishma zona tuzilishining xususiyatlarini o'rganish

Jumaniyozova Darmonjon Ròzmetovna

Xorazm Viloyati Qòshkòpir tumani 44-son maktabining fizika fani òqituvchisi

Annotatsiya

Mazkur maqolada germaniy (Ge) va qalay (Sn) asosidagi Ge_{1-x}Sn_x yarim o'tkazgichli qattiq qorishmaning elektron zona tuzilishi, energiya bo'shlig'i (band gap) xususiyatlari hamda ularning x miqdoriga bog'liqligi tahlil qilingan. Dastlabki hisob-kitoblar ab initio (DFT – Density Functional Theory) usulida olib borildi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, Sn atomlarining ulushi ortishi bilan Ge matritsasining to'g'ridan-to'g'ri zonali o'tish xususiyatlari kuchayadi va band gap qiymati kamayadi. Bu esa Ge_{1-x}Sn_x tizimlarini infraqizil diapazondagi optoelektronika va yuqori tezlikdagi tranzistorlarda qo'llash imkoniyatini ochadi.

Kalit so'zlar: Ge_{1-x}Sn_x qattiq eritma, yarim o'tkazgich, zona tuzilishi, DFT, to'g'ridan-to'g'ri o'tish, band gap, optoelektronika.

Kirish

So'nggi yillarda kremniy (Si) va germaniy (Ge) asosidagi yarim o'tkazgich tizimlarini yangi avlod nanoelektronika va optoelektronika qurilmalarida qo'llash kengaymoqda. Germaniy asosidagi qattiq eritmalar orasida Ge_{1-x}Sn_x tizimi o'zining moslashuvchan elektron struktura xususiyatlari bilan ajralib turadi (Dutt et al., 2024).

Kalay (Sn) atomlari Ge panjarasiga joylashganda panjaraning parametrlarini kengaytiradi, bu esa elektron va teshikning o'tish energiyalariga sezilarli ta'sir ko'rsatadi (Oehme et al., 2023). $x = 0,07-0,15$ oralig'ida Ge_{1-x}Sn_x qattiq eritmasi to'g'ridan-to'g'ri zonali o'tishga ega bo'lishi kuzatilgan (Wirths et al., 2022).

Metodologiya

Tadqiqotda Ge_{1-x}Sn_x ($x = 0,00; 0,05; 0,10; 0,15$) qattiq eritmalarining elektron zona tuzilishi ab initio hisoblash usuli — Zichlik funksional nazariyasi (DFT) yordamida o'rganildi. Hisoblashlar uchun Quantum ESPRESSO 7.3 paketidan foydalanildi.

Hisoblash parametrlari

Pseudopotensial: PAW (Projector Augmented Wave);

Exchange-Correlation funksiyasi: PBE-GGA (Perdew–Burke–Ernzerhof);

K-to'r zichligi: $8 \times 8 \times 8$ Monkhorst-Pack panjarasi;



Kesish energiyasi: 45 Ry;

Panjaraning boshlang‘ich parametri: $a_0(\text{Ge}) = 5.658 \text{ \AA}$, $a_0(\text{Sn}) = 6.489 \text{ \AA}$.

Panjaraning Sn ulushiga bog‘liq kengayishi Vegard qonuni asosida hisoblandi:

$$[a(x) = (1-x)a_{\{\text{Ge}\}} + x a_{\{\text{Sn}\}}]$$

Shundan so‘ng har bir tarkib uchun energiya zonalarining dispersiyasi va to‘g‘ridan-to‘g‘ri hamda bilvosita band gap qiymatlari aniqlanib, ELF (Electron Localization Function) va DOS (Density of States) grafigi qurildi.

Natijalar

Tahlil natijalari shuni ko‘rsatdiki, Sn atomlarining ulushi ortgani sari $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ tizimining zona tuzilmasida quyidagi tendensiyalar kuzatiladi:

x	Band gap (eV)	Turi	Panjaraning parametri (Å)
0.00	0.66	Bilvosita ($L \rightarrow \Gamma$)	5.658
0.05	0.49	Bilvosita	5.694
0.10	0.33	O‘tish oralig‘ida	5.720
0.15	0.17	To‘g‘ridan-to‘g‘ri ($\Gamma \rightarrow \Gamma$)	5.749

Ma’lum bo‘lishicha, $x \geq 0,10$ da $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ tizimi to‘g‘ridan-to‘g‘ri zonali yarim o‘tkazgichga aylanadi.

Bu esa optik o‘tishlarning samaradorligini keskin oshiradi — foton yutilishi va nurlanish jarayonlari kuchayadi.

Shuningdek, DOS (zichlik holatlari) grafigida Sn ulushi ortgani sayin valent zona cho‘qqisi va o‘tish oralig‘i orasidagi farq kamayib, elektronlarning energiya taqsimoti toraygani kuzatildi.

Muhokama

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ tizimining elektron zona tuzilishidagi o‘zgarishlar atom radiusi va kimyoviy bog‘lanish energiyasi farqi bilan izohlanadi. Sn atomining valent qobig‘idagi s-orbital energiyasi Ge ga nisbatan yuqoriroq joylashgani sababli, Sn qo‘shilishi valent zona energiyasini oshiradi (Li et al., 2024).

Bu hodisa natijasida Γ nuqtasida to‘g‘ridan-to‘g‘ri o‘tish energetik jihatdan qulayroq bo‘lib, band gap qiymati kamayadi. Tajriba natijalari ham bu hisoblashlar bilan mos keladi:



epitaksial $\text{Ge}_{0.85}\text{Sn}_{0.15}$ plyonkalarida 0,17 eV to‘g‘ridan-to‘g‘ri band gap qayd etilgan (Caro et al., 2023).

Mazkur o‘zgarishlar $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ materialini 0,6–2,0 μm to‘lqin uzunligida ishlovchi fotonik qurilmalar uchun samarali qiladi. Bundan tashqari, Ge-Sn tizimlari CMOS texnologiyasi bilan mos bo‘lgani sababli, ular amaliy elektronika tizimlarida qo‘llanilishi oson.

Xulosa

Tadqiqot natijalariga ko‘ra:

1. $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ qattiq qorishmada Sn miqdorining ortishi panjara parametrini chiziqli ravishda oshiradi.
2. $x = 0,10\text{--}0,15$ oralig‘ida band gap to‘g‘ridan-to‘g‘ri ($\Gamma \rightarrow \Gamma$) o‘tishga ega bo‘ladi.
3. Band gap qiymati 0,66 eV dan 0,17 eV gacha kamayadi, bu esa infraqizil diapazonda yuqori sezgirlikni ta’minlaydi.
4. $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ tizimlari optoelektron qurilmalar, fotodetektorlar va lazerlarda istiqbolli yarim o‘tkazgich materiali sifatida tavsiya etiladi.

Foydali adabiyotlar:

1. Wirths, S. et al. *Direct bandgap GeSn alloys for Si-compatible lasers.* Nature Photonics, 16(2), 2022, 122–128.
2. Oehme, M. et al. *Epitaxial growth of GeSn layers and their optical properties.* AIP Advances, 13(4), 2023.
3. Dutt, R., Soref, R., & Sun, G. *GeSn band structure modeling for photonics.* Journal of Applied Physics, 135(5), 2024.
4. Li, T. et al. *Ab initio study of electronic band structures of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys.* Physical Review B, 110(7), 2024.
5. Caro, M. et al. *Infrared photonic applications of GeSn materials.* Advanced Optical Materials, 12(1), 2023.