



$Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq qotishmasining elektron tuzilishini modellashtirish va tahlil qilish

Jumaniyozova Darmonjon Ròzmetovna

Xorazm Viloyati Qòshkòpir tumani 44-son maktabining fizika fani òqituvchisi

Annotatsiya

Mazkur maqolada $Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq qotishmalarining elektron tuzilishini modellashtirish va tahlil qilish jarayonlari yoritilgan. Tadqiqotda elektron zonalar tuzilishining o'zgarishi Sn konsentratsiyasiga bog'liq holda o'rganilgan. Kompyuter modellashtirish usullari yordamida energetik zonalar oralig'i, to'g'ridan-to'g'ri va bilvosita o'tishlar orasidagi farqlar, hamda qattiq qotishmaning optik va elektr xossalari tahlil qilindi. Natijalar Ge–Sn tizimining yarim o'tkazgich sifatidagi imkoniyatlarini kengaytirish hamda nanoelektronika sohasida qo'llash istiqbollarini aniqlashga xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: $Ge_{1-x}Sn_x$, yarim o'tkazgich, elektron tuzilish, zona energiyasi, modellashtirish, qattiq qotishma.

Kirish

So'nggi yillarda Ge–Sn asosidagi yarim o'tkazgichli materiallarga bo'lgan qiziqish keskin ortdi. Buning sababi — bu materiallarning kremniy texnologiyasi bilan mos kelishi va optoelektron qurilmalarda qo'llanilish imkoniyatlarining kengligidir. Ge–Sn tizimi, ayniqsa, infraqizil diapazonda ishlovchi detektorlar, lazerlar va yuqori tezlikdagi tranzistorlar uchun istiqbolli material sifatida e'tirof etilmoqda. $Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq qotishmasida Sn atomlarining miqdori oshishi bilan energetik zonalar oralig'i kamayib boradi, bu esa to'g'ridan-to'g'ri o'tishli yarim o'tkazgich hosil bo'lishiga olib keladi. Shu sababli ushbu tizimning elektron tuzilishini chuqur tahlil qilish dolzarb ilmiy vazifalardan biridir.

Metodologiya

Tadqiqotda $Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq qotishmasining elektron tuzilishini modellashtirish uchun ab initio DFT (Density Functional Theory) asosidagi hisoblash usuli qo'llanildi. Hisob-kitoblar Quantum ESPRESSO dasturi yordamida olib borildi. Ge va Sn atomlari uchun ultrasoft potentsiallar tanlandi, energiya kesimi 60 Ry diapazonda o'rnatildi. Brillouin zonasining tarmoq nuqtalari Monkhorst–Pack sxemasi asosida tanlandi. Sn



atomlarining ulushi (x) 0,05 dan 0,3 gacha o'zgartirilib, har bir holat uchun elektron energetik tuzilma hisoblandi. Modelni barqarorlashtirish uchun atomlarning geometrik optimizatsiyasi amalga oshirildi.

Natijalar

Hisoblash natijalari shuni ko'rsatdiki, $Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq qotishmasida Sn miqdorining ortishi bilan energiya zonalar oralig'i (E_g) sezilarli darajada kamayadi. $x = 0,05$ da $E_g \approx 0,66$ eV bo'lsa, $x = 0,3$ da bu qiymat 0,39 eV gacha tushdi. Bu esa materialni to'g'ridan-to'g'ri o'tishli yarim o'tkazgichga aylantirish imkonini beradi. Band tuzilishining tahlili shuni ko'rsatadiki, Sn atomlari valent zona maksimumini ko'taradi va o'tkazuvchanlik zonasining minimumini pasaytiradi. Shu tariqa, Sn kiritilishi materialning optik faoliyatini oshiradi va infraqizil diapazonda yorug'likni yutish xususiyatini kuchaytiradi.

Munozara

Olingan natijalar boshqa nazariy va eksperimental tadqiqotlar bilan solishtirilganda yaxshi moslik ko'rsatdi. Sn miqdorining oshishi natijasida Ge–Sn tizimi to'g'ridan-to'g'ri o'tishli yarim o'tkazgich holatiga o'tadi, bu esa optoelektron qurilmalar uchun muhim afzallikdir. Shu bilan birga, Sn konsentratsiyasi haddan tashqari ko'payganda kristall panjarasining deformatsiyasi kuchayadi, bu esa elektron harakatchanligini pasaytiradi. Shu sababli optimal Sn ulushi 0,15–0,20 atrofida tanlanishi tavsiya etiladi. Tadqiqotlar natijasida Ge–Sn qotishmasining lazer diodlari va infraqizil detektorlar uchun samarali material bo'lishi isbotlandi.

Xulosa

Tadqiqot natijalariga ko'ra, $Ge_{1-x}Sn_x$ qattiq qotishmasining elektron tuzilishi Sn konsentratsiyasiga sezilarli darajada bog'liqdir. Sn atomlarining qo'shilishi materialning energetik zonalar oralig'ini kamaytiradi va to'g'ridan-to'g'ri o'tishli yarim o'tkazgich xususiyatlarini shakllantiradi. Bu esa Ge–Sn tizimini zamonaviy optoelektron qurilmalar, lazerlar, va infraqizil sensorlar uchun istiqbolli material sifatida e'tirof etishga imkon beradi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Oehme M. et al. "GeSn: A group IV material with direct band gap," Semiconductor Science and Technology, 2015.
2. Wirths S. et al. "Direct bandgap GeSn alloys for optoelectronic applications,"



Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, 2016.

3. Gupta S. et al. "Sn incorporation in Ge for bandgap engineering," Applied Physics Letters, 2013.

4. Moontragoon P., Ikonik Z., Harrison P. "Band structure calculations of GeSn alloys," Semiconductor Science and Technology, 2012.