NUQTAVIY NUQSONLAR KONSENTRATSIYASINI HISOBLASHDA REACTION–DIFFUSION TENGLAMALARIDAN FOYDALANISH

f-m.f.f.d. PhD., **I.I. Anarboyev**
Andijon davlat texnika instituti

Jaxanova Zarina Jamil qizi
tadqiqotchi
Doi:https://doi.org/10.5281/zenodo.22923820

Annotatsiya: Ion implantatsiyalangan materiallarda hosil bo‘ladigan nuqtaviy nuqsonlar (vakansiya va interstitial atomlar) konsentratsiyasining fazoviy-vaqt taqsimotini hisoblash uchun reaction–diffusion tenglamalar tizimidan foydalanish masalasi ko‘rib chiqilgan. Diffuziya jarayoni bilan bir qatorda vakansiya-interstitial rekombinatsiyasini ham hisobga oluvchi matematik model taqdim etilgan va u chekli ayirmalar usuli yordamida sonli yechilgan. Modellashtirish natijalari implantatsiyadan so‘ng nuqson profilining vaqt o‘tishi bilan qanday kengayishi va rekombinatsiya hisobiga amplitudasining pasayishini ko‘rsatadi. Olingan natijalar Si va W kabi materiallarning yuzaki qatlam xossalarini maqsadli loyihalashda amaliy ahamiyatga ega.

Kalit so‘zlar: nuqtaviy nuqsonlar, reaction–diffusion tenglamalari, ion implantatsiyasi, vakansiya, interstitial, rekombinatsiya, sonli modellashtirish.

Ion implantatsiyasi jarayonida qattiq jism kristall panjarasida vakansiya va tugunlararo atomlar (interstitial) ko'rinishidagi nuqtaviy nuqsonlar hosil bo'ladi. Ushbu nuqsonlarning fazoviy taqsimoti va vaqt bo‘yicha evolyutsiyasi materialning yuzaki qatlam xossalarini (mikroqattiqlik, elektr o‘tkazuvchanlik, optik xususiyatlar) belgilovchi asosiy omillardan biri hisoblanadi. Nuqson kinetikasini to'g'ri tavsiflash uchun reaction–diffusion (reaksiya-diffuziya) tenglamalar tizimidan foydalanish maqsadga muvofiq, chunki bunday model diffuziya jarayoni bilan bir qatorda vakansiya-interstitial rekombinatsiyasi kabi reaksion jarayonlarni ham hisobga oladi [1].

Si (kremniy) uchun material parametrlari va optik-fotoelektrik xususiyatlari

Kremniy (Si) uchun model parametrlarini aniqlashtirish maqsadida ba’zi material xususiyatlari alohida qayd etiladi: Si taqiqlangan zona kengligi xona haroratida Eg = 1,12 eV ni tashkil etadi, bu nuqson energetik darajalarining zona ichidagi joylashuvini baholashda hisobga olinishi lozim. Kristallografik yo‘nalishga bog‘liq holda, Si(111) yuzasida Si(110) ga nisbatan nuqtaviy nuqsonlar zichligi odatda kamroq kuzatiladi, bu esa yuzaki atomlar zichligi va bog‘lanish geometriyasidagi farq bilan izohlanadi. Bundan tashqari, termik qizdirishdan (annealing) so‘ng nuqson profilining fazoviy qayta taqsimlanishi kuzatiladi — bu esa G(x,t) manba hadi va D diffuziya koeffitsientining haroratga bog‘liqligini modelga kiritish zaruratini ko‘rsatadi [2].

Nuqtaviy nuqsonlar Si taqiqlangan zonasi ichida qo‘shimcha energetik darajalar hosil qilib, materialning optik va fotoelektrik xususiyatlariga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Xususan, chuqur (deep-level) nuqson darajalari nurlanishsiz rekombinatsiya markazlari sifatida namoyon bo‘lib, fotolyuminessensiya intensivligini pasaytiradi va yutilish chetining (absorption edge) shaklini o‘zgartiradi [3]. Fotoelektrik nuqtai nazardan, nuqson konsentratsiyasining oshishi yorug‘lik ta’sirida hosil bo‘lgan noosnoviy

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

tashuvchilarning umr davomiyligini qisqartiradi, bu esa ion implantatsiyalangan Si asosidagi fotodetektor va quyosh elementlarining fotojavobi (photoresponse) va samaradorligini pasaytirishi mumkin. Shu sababli, reaction–diffusion modeli asosida olingan nuqson profili nafaqat mexanik-elektrik, balki optik va fotoelektrik xususiyatlarni bashorat qilishda ham boshlang'ich ma'lumot sifatida ishlatilishi mumkin.

Adabiyotlar tahliliga qisqacha sharh

Ion implantatsiyasi materiallar yuzaki qatlam xossalarini maqsadli o'zgartirishning keng qo'llaniladigan usullaridan biri bo'lib, uning natijasi ko'p jihatdan hosil bo'lgan nuqtaviy nuqsonlarning fazoviy taqsimoti va vaqt bo'yicha rivojlanishiga bog'liq [4]. Bunday jarayonlarni analitik yo'l bilan to'liq tavsiflash imkonsiz bo'lgani sababli, adabiyotlarda asosan sonli modellashtirish usullaridan foydalanilgan. Shu bilan birga, ko'plab mavjud ishlarda faqat sof diffuziya modeli qo'llanilib, rekombinatsiya jarayonining nuqson konsentratsiyasini cheklovchi ta'siri e'tibordan chetda qolgan, bu esa reaction–diffusion yondashuvini yanada rivojlantirishni dolzarb qiladi.

Ion implantatsiyasi natijasida hosil bo'ladigan nuqtaviy nuqsonlarning asosiy turlari va ularning qisqacha tavsifi 2-jadvalda keltirilgan.

2-jadval. Nuqtaviy nuqsonlarning asosiy turlari (adabiyotlar asosida umumlashtirish)

Nuqson turi	Qisqacha tavsifi	Kinetik xususiyati
Vakansiya (Cv)	Kristall panjaradagi bo'sh tugun o'rni	Harorat oshishi bilan harakatchanligi ortadi
Interstitial (Ci)	Panjara tugunlari orasidagi ortiqcha atom	Odatda vakansiyaga nisbatan yuqori harakatchanlikka ega
Vakansiya-interstitial jufti	Yaqin joylashgan Cv va Ci	Rekombinatsiyaga moyil, umumiy nuqson sonini kamaytiradi
Klaster nuqsonlar	Bir nechta nuqtaviy nuqsonning birlashuvi	Past harakatchanlik, barqarorroq tuzilma

Matematik model

Vakansiya (Cv) va interstitial (Ci) konsentratsiyalarining vaqt va fazo bo'yicha o'zgarishi quyidagi ko'rinishdagi bog'langan reaction–diffusion tenglamalar tizimi bilan tavsiflanadi:

$$\partial C/\partial t = D\cdot\partial^2 C/\partial x^2 - kR\cdot Cv\cdot Ci + G(x,t)$$

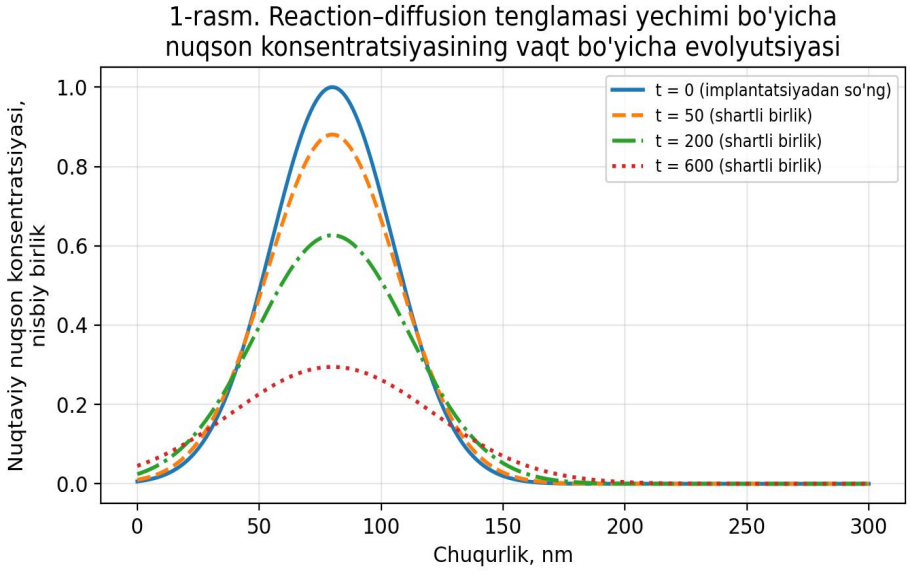
bunda D — diffuziya koeffitsienti, kR — rekombinatsiya konstantasi, G(x,t) — implantatsiya jarayonida nuqson hosil bo'lish tezligi (manba hadi), x — chuqurlik, t — vaqt. Ushbu tizim nolinial xususiyatga ega bo'lgani sababli, uni faqat sonli usullar yordamida yechish mumkin [5].

Tenglamalar tizimini sonli yechish uchun adabiyotlarda ko'rib chiqilgan asosiy usullar — aniq va noma'lum chekli ayirmalar sxemalari hamda chekli elementlar usuli — tahlil qilindi. Aniq sxemalar sodda amalga oshirilishi bilan ajralib tursada, barqarorlik sharti (Courant mezoni) qadam kattaligiga qattiq cheklov qo'yadi. Noma'lum sxemalar barqaror bo'lsada, har bir vaqt qadamida chiziqli tenglamalar tizimini yechishni talab qiladi [6]. Ushbu tadqiqotda vakansiya va interstitial

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

konsentratsiyalari uchun bog‘langan ikkita parabolik xususiy hosilali differensial tenglamadan iborat model qo‘llanildi va tizim chekli ayirmalar usuli yordamida sonli yechildi.

Modellashtirish natijalari shuni ko‘rsatdiki, implantatsiyadan so‘ng dastlab Gauss taqsimotiga yaqin bo‘lgan nuqson profili vaqt o‘tishi bilan diffuziya hisobiga kengayadi va rekombinatsiya hisobiga umumiy amplitudasi pasayadi (1-rasm). Boshlang‘ich bosqichda (t = 0–50 shartli birlik) profil shakli asosan implantatsiya energiyasi bilan belgilansa, keyingi bosqichlarda (t > 200) diffuziya-rekombinatsiya muvozanati profil shaklini asta-sekin tekislashtiradi.



1-rasm. Reaction–diffusion tenglamasi yechimi bo‘yicha nuqson konsentratsiyasining vaqt bo‘yicha evolyutsiyasi

Olingan natijalar reaction–diffusion yondashuvining nuqtaviy nuqsonlar kinetikasini tavsiflashda faqat sof diffuziya modeliga nisbatan aniqroq bashorat berishini ko‘rsatadi, chunki u rekombinatsiya jarayonining nuqson konsentratsiyasini cheklovchi ta’sirini hisobga oladi [7]. Bundan tashqari, model asosida olingan profil shakllari materialning yuzaki qatlam xossalarini bashorat qilish uchun boshlang‘ich ma’lumot sifatida ishlatilishi mumkin.

Model parametrlari

Modellashtirishda qo‘llanilgan asosiy parametrlarning adabiyotlarda uchraydigan tipik qiymatlar oralig‘i 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval. Reaction–diffusion modeli parametrlarining tipik qiymatlari (illyustrativ)

Parametr	Belgilanishi	Tipik qiymat oralig‘i
Diffuziya koeffitsienti	D	10^{-16} – 10^{-14} sm²/s
Rekombinatsiya konstantasi	kR	10^{-12} – 10^{-10} sm³/s
Proyeksion chuqurlik	Rp	50 – 150 nm
Taqsimot kengligi	σ	15 – 35 nm

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

Xulosa

Ko‘rib chiqilgan model bir o‘lchamli (1D) chuqurlik bo‘yicha taqsimotni tavsiflaydi va material izotrop deb qabul qilingan. Amalda kristall panjaraning anizotropiyasi, harorat gradienti va boshqa nuqson turlari (masalan, klasterlar) ham hisobga olinishi mumkin. Kelgusi tadqiqotlarda modelni 2D/3D holatga kengaytirish va haroratga bog‘liq diffuziya koeffitsientini kiritish rejalashtirilgan.

Reaction–diffusion tenglamalar tizimi ion implantatsiyalangan materiallarda nuqtaviy nuqsonlar konsentratsiyasini hisoblashning samarali vositasi bo‘lib, keyingi bosqichda ushbu modelni aniq materiallar (Si, W) uchun eksperimental ma’lumotlar bilan tekshirish talab etiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Ziegler, J.F., Ziegler, M.D., Biersack, J.P. SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010). Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 2010, Vol. 268, No. 11–12, pp. 1818–1823. DOI: 10.1016/j.nimb.2010.02.091.
2. Velichko, O.I. Analytical solution of diffusion equation for point defects. arXiv:1406.6433, 2014.
3. Bai, X.M., Voter, A.F., Hoagland, R.G., Nastasi, M., Uberuaga, B.P. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission. Science, 2010, Vol. 327, No. 5973, pp. 1631–1634.
4. Theoretical modeling of defect diffusion in wide bandgap semiconductors. Journal of Applied Physics, 2024, Vol. 135, Article 170902. DOI: 10.1063/5.0205866.
5. Ferroni, F., Yi, X., Arakawa, K., Fitzgerald, S.P., Edmondson, P.D., Roberts, S.G. High temperature annealing of ion irradiated tungsten. Acta Materialia, 2015, Vol. 90, pp. 380–393. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.01.067.
6. Wu, J., Balbuena, J.-P., Hu, Z., Jantunen, V., Barthe, M.-F., Caturla, M.J., Granberg, F. High-dose long-time defect evolution in tungsten studied by atomistically informed Object Kinetic Monte Carlo simulations.2409.15856, 2024.
7. Distinctive features of diffusion-controlled radiation defect recombination in stoichiometric magnesium aluminate spinel single crystals and transparent polycrystalline ceramics. Scientific Reports, 2020, Vol. 10, Article 7910. DOI: 10.1038/s41598-020-64778-8.

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.