

YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ KRİTİK NÖQTƏLƏRİN MÜXTƏLİF HALLARI ÜÇÜN KOMPLEKS DİELEKTRİK FUNKSİYASININ SPEKTRAL ASILILIQLARININ MÜQAYİSƏSİ

M.H. HÜSEYNƏLİYEV

AMEA Naxçıvan Bölməsi Təbii Ehtiyatlar İnstitutu

mamedhuss@mail.ru

Açar sözlər: yarımkeçirici, kritik nöqtə, "Graphical analysis", fitting, kompleks dielektrik funksiyası, həqiqi hissə, xəyali hissə, parametr, RMSE, orta kvadratik xəta.

PACS: 77.22.Ch, 77.84.Dy, 77.90.+k

Məqalədə yarımkeçiricilərdə kritik nöqtələrin müxtəlif halları üçün kompleks dielektrik funksiyasının enerjiden asılılıq ayrılmasının müqayisəli təhlili verilmişdir. Təhlil "Graphical analysis" proqramı vasitəsilə kritik nöqtələri xarakterizə edən m -parametrinin dörd qiyməti üçün yerinə yetirilmişdir.

Ellipsometrik ölçmələrdən nəticə olaraq ε kompleks dielektrik funksiyasının ε_1 həqiqi və ε_2 xəyali hissələrinin enerjiden asılılıq qrafikləri alınır. Bu funksiya həm də 700-dən çox nöqtənin asılılıq şəklində rəqəmsal olaraq koordinatlarla verilmiş olur və ona görə də bu asılılıq asanlıqla hər hansı bir proqramda qurmaq və analizini aparmaq mümkündür. Bir çox müəlliflər fitting prosesini yerinə yetirərkən çox mürəkkəb hesablamalardan, Savitski-Golay alqoritmlərindən, SA alqoritmlərindən [1-3], və s. istifadə etmişlər.

Halbuki "Graphical analysis" proqramı bu məqsəd üçün çox əlverişli bir proqramdır [4,5], çünki bu

proqramla qurulmuş əyrinin və yaxud onun müəyyən oblastının fittingini aparmaq (yəni həmin əyri ilə maksimum üst-üstə düşə bilən nəzəri asılılıqları müəyyən etmək) mümkündür. Konkret olaraq spektroskopik ellipsometriya məsələlərinin həlli zamanı eksperimental kompleks dielektrik funksiyası $\varepsilon(\omega)$ -nin ikinci tərtib törəmələrinin həqiqi və xəyali hissələri üçün alınmış asılılıqların fittingi belə məsələlərin həllində istifadə olunan nəzəri funksiyaların vasitəsilə aparılır. Nəticədə bu funksiyalara daxil olan sabitlər təyin olunur. Bu sabitlərdən biri də E -kritik nöqtəsidir ki, bu da yarımkeçiricilər nəzəriyyəsi üçün çox mühüm kəmiyyətdir.

Bildiyimiz kimi kompleks dielektrik funksiyası üçün nəzəri analitik ifadənin ikinci tərtib törəməsi $m \neq 0$ halı üçün aşağıdakı şəkildədir [6,7]:

$$\frac{d^2 \varepsilon}{d\omega^2} = A^1(\Omega)^{m-2/2} \left\{ \cos \left[(m-2) \arg \cos \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] + i \sin \left[(m-2) \arg \sin \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] \right\} \quad (1)$$

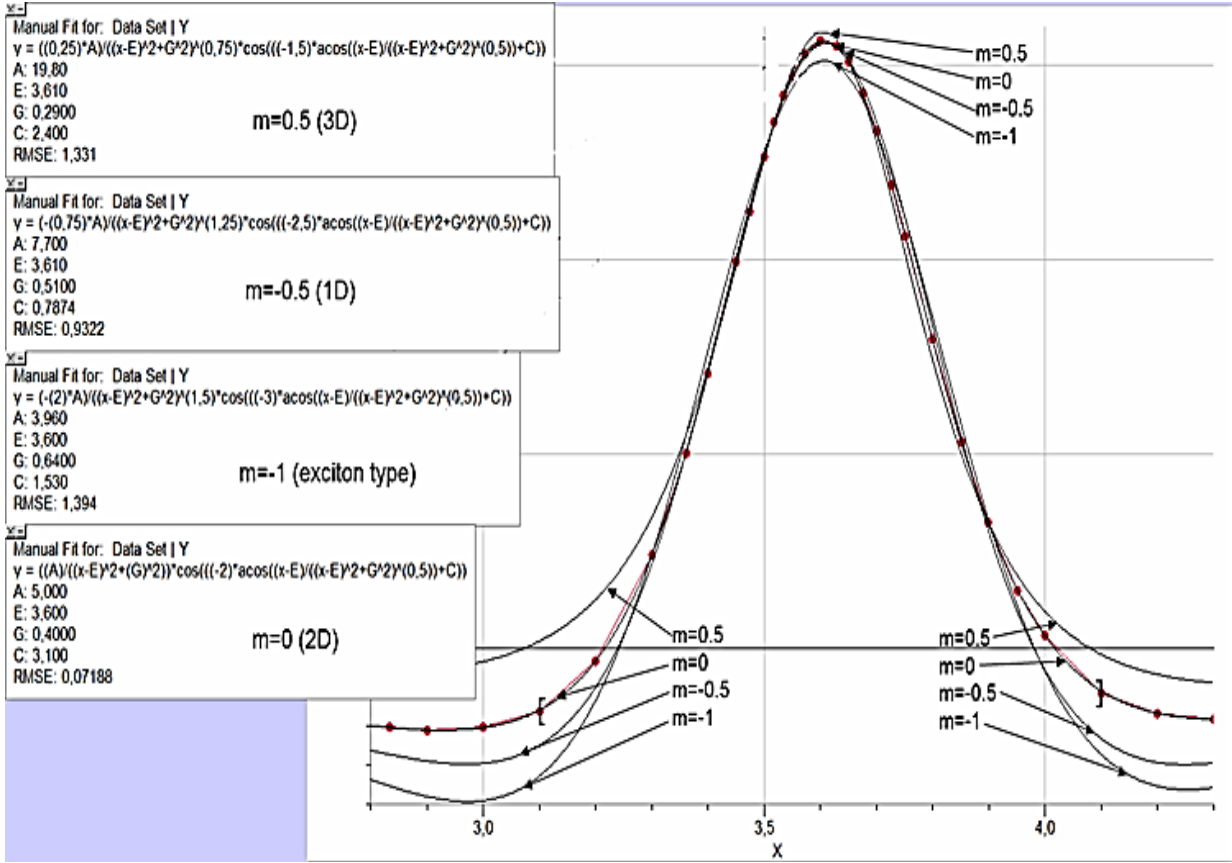
harada ki, $A^1 = -m(m-1)A$ və $\Omega = (\omega-E)^2 + \Gamma^2$, burada A -amplituda, E -kritik nöqtə, Γ - genişlənmə, θ -isə eksiton faza bucağıdır.

İfadəyə daxil olan m kəmiyyəti üç müxtəlif qiymət ala bilər: $m = \frac{1}{2}$ kritik nöqtənin üçölçümlü (3D), $m = -\frac{1}{2}$

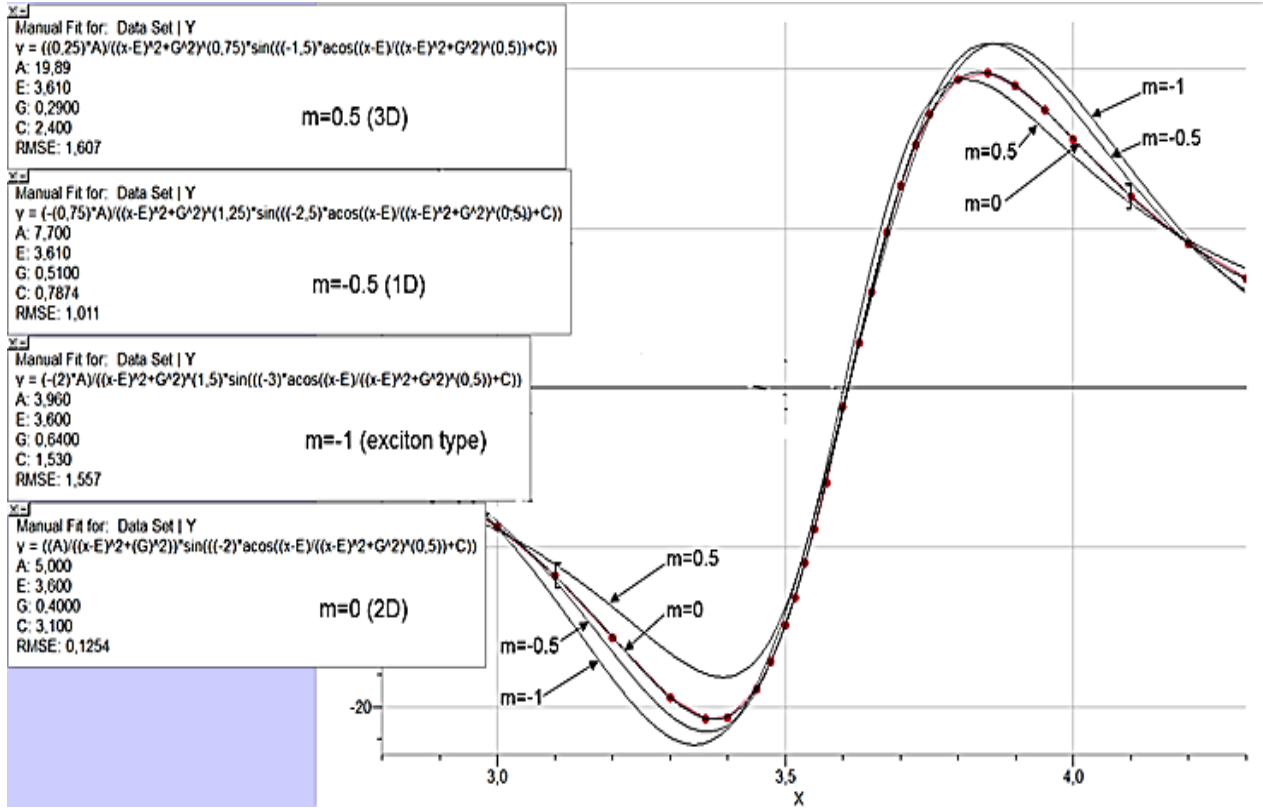
birölçümlü (1D) halına aiddir; $m = -1$ isə eksiton tip kritik nöqtədir [8]. $m = 0$ ikiölçümlü (2D) hal üçün (1) ifadəsi aşağıdakı kimi olur:

$$\frac{d^2 \varepsilon}{d\omega^2} = \frac{A}{\Omega} \left\{ \cos \left[-2 \arg \cos \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] + i \sin \left[-2 \arg \sin \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] \right\} \quad (2)$$

Yuxarıda qeyd olunduğu kimi $d^2 \varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və $d^2 \varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ ayrıləri fittingə cəlb olunarkən ən yaxşı fitting halı A , E , Γ və θ -parametrlərindən əlavə həm də m sabitinin ala biləcəyi dörd qiymətdən birinin seçilməsi ilə müəyyən olunur. Fitting apararkən bu sabitlərdən hər hansı birinin seçilməsi həmin sabitin digər üç sabitlə müqayisədə eksperimental asılılıqla daha çox üst-üstə düşməsi, yəni fitting xətasının daha kiçik olması ilə müəyyən olunur ki, bu xəta "Graphical analysis" proqramında RMSE (root mean-square error -orta kvadratik xəta) göstəricisi ilə qiymətləndirilir.



Şəkil 1. m -in müxtəlif qiymətləri üçün kompleks dielektrik funksiyasının ikinci tərtib törəməsinin həqiqi hissəsinin enerjiden asılılıq əyriləri



Şəkil 2. m -in müxtəlif qiymətləri üçün kompleks dielektrik funksiyasının ikinci tərtib törəməsinin xəyali hissəsinin enerjiden asılılıq əyriləri

m -in müxtəlif qiymətləri üçün aparılan fittinglərin bir-birlərindən nə qədər xəta ilə fərqlənmələrinə aydınlıq gətirmək üçün xüsusi olaraq $m = 0$ qiyməti üçün təxminən 100%-li fittingi mümkün olan eksperimental $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ ayrıləri qurulmuş və həmin asılılıqların m -in digər qiymətləri ilə fittingi aparılaraq alınan RMSE xətaləri müəyyən edilmişdir (şəkil 1,2).

Fitting ayrılərindən göründüyü kimi m -in müxtəlif qiymətlərində A, E, Γ və θ -parametrlərindən yalnız demək olar ki, E-parametri dəyişməz qalır, yəni m -in müxtəlif qiymətlərində aparılan fitting kritik nöqtələrin qiymətinin tapılmasına təsir etmir. Bu nəticəni fitting prosesinin ən uğurlu xüsusiyyəti hesab etmək olar.

Orta kvadratik xətalər isə $m = 0$ qiyməti ilə müqayisədə bir-birlərindən çox da fərqlənmirlər. Ən

böyük xəta üçölçülü $m = 0,5$ (3D) parametrinə aid olan fitting ilə $m = -1$ (eksiton tip kritik nöqtə) parametrinə aid olan fitting halları arasında olur.

Burada bir məsələni də xüsusi olaraq qeyd etmək lazımdır ki, θ -nın aldığı qiymətlər arasında müəyyən bir qanunauyğunluq vardır.

Belə ki, $m = -\frac{1}{2}$, $m = -1$, $m = \frac{1}{2}$ və $m = 0$

qiymətləri üçün aparılan fitting nəticəsində θ -nın aldığı qiymətlər bir-birlərini $\pi/4$ bucağı qədər qabaqlayırlar. Doğrudan da, şəkil 1 və 2-dən göründüyü kimi, fittinglər θ -nın uyğun olaraq $\pi/4$, $\pi/2$, $3\pi/4$ və π qiymətlərində alınmışdır.

-
- [1] *M. León, R.Serna, S. Levchenko, A.Nateprov, A.Nicorici, J. M. Merino and E. Arushanov*, Modeling the optical constants of $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$ and CuGa_3Se_5 crystals. // J. Appl. Phys., 2007, vol. 101, p. 013524
- [2] *M. Corana, C. Marchesi, Martini, and S. Ridella*, Minimizing multimodal functions of continuous variables with the “Simulated annealing” algorithm. // ACM Transactions on Mathematical Software, 1987, vol. 13, No. 3, p. 262-280
- [3] *M. Кардона*, Модуляционная спектроскопия. Москва: Мир, 1972, 416 с.
- [4] *M.H. Hüseynəliyev, O.R. Əhmədov, N.M. Abdullayeva, X.N. Xəlilova, N.A. Qasimov* Spektroskopik ellipsometriya ölçmələrinin tədqiqində “Graphical analysis” proqramının tətbiqinin üstünlükləri // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, 2015, №5 s.100-103
- [5] *M.H. Hüseynəliyev* Qurğuşun sulfid monokristallarının dielektrik xassələri və kritik nöqtələrinin təyini // AMEA Naxçıvan Bölməsi, “Xəbərlər”, 2016, №4, s.240-246
- [6] *J.G. Albornoz, R. Serna, M. Leon* Optical properties and electronic structure of polycrystalline $\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x\text{InSe}_2$ alloys // J. Appl. Phys. 97, (2005), p.103515 (1-7)
- [7] *S.G. Choi, H.Y. Zhao, C.Persson* Dielectric function spectra and critical point energies of $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ from 0,5 to 9,0 eV // J. Appl. Phys. 111, (2012), p.033506 (1-6)
- [8] *P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, and M. Cardona* Interband critical points of GaAs and their temperature dependence // Phys. Rev. B, 35, (1987), p.9174