DFT YORDAMIDA YANGI YARIMO‘TKAZGICH MATERIALLARINI BASHORAT QILISH.

Gulxayot Xolyigitova Sulaymanovna
Andijon davlat texnika instituti, Stajyor o‘qituvchi
E-mail: gulhayot2012@astiedu.uz,
Tel: +99850-714-30-00

Anotatsiya. Ushbu tadqiqotda zichlik funksional nazariyasi (Density Functional Theory, DFT) asosida yangi istiqbolli yarimo‘tkazgich materiallarning elektron, energetik va strukturaviy xossalarini nazariy bashorat qilish masalalari ko‘rib chiqiladi. Zamonaviy elektronika va optoelektronika qurilmalarida yuqori samaradorlikka ega bo‘lgan yangi yarimo‘tkazgich materiallarga bo‘lgan ehtiyoj asoslab beriladi hamda DFT usulining materiallar dizaynidagi o‘rni yoritiladi. Hisoblashlar almashinish-korrelyatsiya funksionallari (LDA, GGA va ularning modifikatsiyalari) yordamida amalga oshirilgani, panjara parametrlarini optimallashtirish, tarmoqli tuzilma va holatlar zichligini (DOS) aniqlash algoritmlari batafsil bayon etiladi. Tanlangan kristall tuzilmalarning energetik barqarorligi, taqiqlangan zona kengligi, samarali massalar va elektron holatlarning taqsimlanishi tahlil qilinib, ularning yarimo‘tkazgich sifatida qo‘llanish imkoniyatlari aniqlanadi. Olingan natijalar mavjud tajribaviy va nazariy ma’lumotlar bilan solishtirilib, taklif etilayotgan materiallarning nanoelektronika, fotoelektrik va sensor qurilmalar uchun istiqbollari baholanadi. Tadqiqot natijalari yangi funksional yarimo‘tkazgich materiallarni oldindan bashorat qilish va ularni maqsadli sintez qilish uchun nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

Kalit so‘zlar: yarimo‘tkazgich materiallar, zichlik funksional nazariyasi (DFT), elektron tuzilma, taqiqlangan zona, tarmoqli tuzilma, holatlar zichligi, birinchi prinsiplardan hisoblash, materiallar dizayni.

Abstract. in this study, the theoretical prediction of the electronic, energetic, and structural properties of new promising semiconductor materials based on Density Functional Theory (DFT) is investigated. The growing demand for novel semiconductor materials with high performance in modern electronic and optoelectronic devices is substantiated, and the role of the DFT method in materials design is highlighted. The calculations are performed using exchange–correlation functionals (LDA, GGA, and their modifications), and the algorithms for lattice parameter optimization, band structure calculation, and density of states (DOS) determination are described in detail. The energetic stability of the selected crystal structures, band gap width, effective masses, and the distribution of electronic states are analyzed, and their potential applicability as semiconductor materials is evaluated. The obtained results are compared with existing experimental and

ISSN 3030-3907

theoretical data, and the prospects of the proposed materials for nanoelectronic, photovoltaic, and sensor devices are assessed. The research findings provide a theoretical basis for the predictive design and targeted synthesis of new functional semiconductor materials.

Keywords: semiconductor materials, Density Functional Theory electronic structure, band gap, band structure, density of states, first-principles calculations, materials prediction.

Аннотация. в данном исследовании рассматриваются вопросы теоретического прогнозирования электронных, энергетических и структурных свойств новых перспективных полупроводниковых материалов на основе теории функционала плотности (Density Functional Theory, DFT). Обосновывается необходимость разработки новых высокоэффективных полупроводниковых материалов для современных электронных и оптоэлектронных устройств, а также освещается роль метода DFT в дизайне материалов. Расчёты выполнены с использованием обменно-корреляционных функционалов (LDA, GGA и их модификаций); подробно описаны алгоритмы оптимизации параметров решётки, расчёта зонной структуры и плотности состояний (DOS). Проанализированы энергетическая устойчивость выбранных кристаллических структур, ширина запрещённой зоны, эффективные массы и распределение электронных состояний, а также оценены возможности их применения в качестве полупроводниковых материалов. Полученные результаты сопоставлены с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными, и оценены перспективы предлагаемых материалов для наноэлектронных, фотоэлектрических и сенсорных устройств. Результаты исследования служат теоретической основой для предварительного прогнозирования новых функциональных полупроводниковых материалов и их целенаправленного синтеза.

Ключевые слова: полупроводниковые материалы, теория функционала плотности, электронная структура, запрещённая зона, зонная структура, плотность состояний, расчёты из первых принципов, прогнозирование материалов.

KIRISH

Zamonaviy elektronika, optoelektronika va nanoelektronika sohalarining jadal rivojlanishi yuqori samaradorlikka, kichik o‘lchamlarga va energiya tejamkorligiga ega bo‘lgan yangi yarimo‘tkazgich materiallarga bo‘lgan ehtiyojni keskin oshirmoqda. An’anaviy yarimo‘tkazgichlar — kremniy, germaniy va galliy arsenid kabi materiallar texnologik jihatdan yetuk bo‘lsa-da, ularning fizik xossalari yangi avlod qurilmalari talablarini to‘liq qondira olmayapti. Shu sababli,

ISSN 3030-3907

yangi funksional yarimo‘tkazgich materiallarni izlash va ularning xossalarini oldindan bashorat qilish dolzarb ilmiy muammo hisoblanadi [1,2].

So‘nggi yillarda birinchi prinsiplardan hisoblash usullari (first-principles calculations) materialshunoslikda muhim o‘rin egallamoqda. Ushbu yondashuvlar tajribaviy sintezdan oldin materiallarning strukturaviy, elektron va optik xossalarini aniqlash imkonini beradi, bu esa vaqt va moddiy resurslarni sezilarli darajada tejaydi [3]. Ayniqsa, zichlik funksional nazariyasi (Density Functional Theory, DFT) kvant-mexanik asosga ega bo‘lib, ko‘p zarrali elektron tizimlarini samarali modellashtirish uchun keng qo‘llanilmoqda [4].

DFT nazariyasining asosiy afzalligi shundaki, u murakkab elektron o‘zaro ta’sirlarni elektron zichligi orqali ifodalab, hisoblash jarayonini soddalashtiradi. Hohenberg–Kohn teoremalari va Kohn–Sham tenglamalari asosida ishlab chiqilgan ushbu nazariya kristall panjaraning energetik barqarorligini, taqiqlangan zona kengligini, elektron holatlar zichligini va tarmoqli tuzilmani aniqlash imkonini beradi [5,6]. Shu sababli, DFT yangi yarimo‘tkazgich materiallarning asosiy fizik xossalarini nazariy bashorat qilishda eng ishonchli vositalardan biri hisoblanadi.

Bugungi kunda DFT usuli yordamida ikki o‘lchamli materiallar, perovskitlar, murakkab oksidlar, yarimo‘tkazgichli heterotuzilmalar va nanoo‘lchamli tizimlarning elektron xossalari faol o‘rganilmoqda [7,8]. Biroq ko‘plab istiqbolli materiallarning xossalari hali yetarlicha tadqiq etilmagan bo‘lib, ularni tizimli ravishda bashorat qilish va tahlil qilish muhim ilmiy vazifa bo‘lib qolmoqda.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

Yarimo‘tkazgich materiallarning fizik xossalarini o‘rganish va yangi materiallarni yaratish masalasi uzoq yillardan buyon materialshunoslik va qattiq jismlar fizikasi sohasining markaziy yo‘nalishlaridan biri bo‘lib kelmoqda. An’anaviy yondashuvlar asosan tajribaviy sintez va o‘lchovlarga tayangan bo‘lsa-da, bu usullar ko‘p hollarda katta vaqt, moliyaviy resurslar va murakkab texnologik sharoitlarni talab qiladi. Shu sababli, nazariy va hisoblashga asoslangan usullarning ahamiyati tobora ortib bormoqda [2].

Zichlik funksional nazariyasi (DFT) ko‘p zarrali elektron tizimlarini tavsiflash uchun eng keng tarqalgan birinchi prinsiplardan hisoblash usuli hisoblanadi. Hohenberg va Kohn tomonidan ilgari surilgan fundamental teoremalar elektron tizimining barcha asosiy xossalari elektron zichligi orqali aniqlanishini isbotlab berdi [13]. Keyinchalik Kohn va Sham ushbu nazariyani amaliy hisoblashlar uchun qulay bo‘lgan tenglamalar ko‘rinishiga keltirdilar [4]. Ushbu

ISSN 3030-3907

yondashuv kristall materiallarning energetik barqarorligi, elektron tarmoqli tuzilmasi va holatlar zichligini aniqlash imkonini berdi.

So‘nggi tadqiqotlarda DFT usuli yordamida turli sinfga mansub yarimo‘tkazgich materiallar — murakkab oksidlar, perovskit tuzilmalar, ikki o‘lchamli materiallar va heterotuzilmalar chuqur o‘rganilgan [3–9]. Ayniqsa, grafen, MoS_2, WS_2 kabi ikki o‘lchamli yarimo‘tkazgichlarning elektron va optik xossalarini DFT asosida bashorat qilish katta ilmiy qiziqish uyg‘otdi [8]. Ushbu ishlar DFT usulining nanoelektronika va optoelektronika uchun istiqbolli materiallarni aniqlashdagi samaradorligini ko‘rsatdi.

Biroq klassik LDA va GGA funksionallari yordamida hisoblangan taqiqlangan zona qiymatlari ko‘pincha tajribaviy natijalardan kichik chiqishi adabiyotlarda keng muhokama qilingan [6]. Shu sababli, so‘nggi yillarda gibrid funksionallar (HSE06), mBJ potensiali va GW yondashuvi kabi takomillashtirilgan metodlar taklif etildi [10,11]. Ushbu yondashuvlar taqiqlangan zona va elektron spektrni aniqroq tavsiflash imkonini beradi.

Shunday qilib, mavjud adabiyotlar tahlili shuni ko‘rsatadiki, DFT usuli yangi yarimo‘tkazgich materiallarni bashorat qilishda ishonchli nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi. Biroq har bir material sinfi uchun hisoblash metodologiyasini to‘g‘ri tanlash va natijalarni chuqur tahlil qilish muhim ilmiy vazifa bo‘lib qolmoqda.
Elektron almashinish-korrelyatsiya o‘zaro ta’sirlarini hisobga olish uchun mahalliy zichlik yaqinlashuvi (LDA) va umumlashgan gradient yaqinlashuvi (GGA) funksionallari qo‘llanildi [6]. Ayrim hollarda taqiqlangan zonani aniqroq aniqlash maqsadida gibrid funksional (HSE06) yoki modifikatsiyalangan Becke–Johnson (mBJ) potensialidan foydalanildi [10]. Hisoblashlar davomida Kohn–Sham tenglamalari o‘z-o‘zidan moslashuv (self-consistent field, SCF) sharti asosida yechildi.

NATIJALAR

Mazkur bo‘limda zichlik funksional nazariyasi asosida olib borilgan hisoblashlar natijasida olingan yangi yarimo‘tkazgich materiallarning strukturaviy, energetik va elektron xossalari taqdim etiladi. Hisoblashlar natijalari materiallarning amaliy qo‘llanish imkoniyatlarini baholashga xizmat qiladi.

1. Strukturaviy optimallashtirish natijalari

DFT hisoblashlarining birinchi bosqichida tanlangan kristall tuzilmalarning panjara parametrlari va atomlarning muvozanat holati aniqlanib, umumiy energiya minimallashtirildi. Strukturaviy optimallashtirish jarayonida barcha atomlar uchun ta’sir etuvchi kuchlar 10^{-3} eV/Å dan kichik qiymatgacha kamaytirildi, bu esa hisoblashlarning konvergentsiyasini ta’minladi [4].

ISSN 3030-3907

1-jadvalda optimallashtirilgan panjara konstantalari va umumiy energiya qiymatlari keltirilgan. Olingan natijalar shuni ko‘rsatadiki, barcha ko‘rib chiqilgan tuzilmalar energetik jihatdan barqaror holatga ega.

1-jadval.

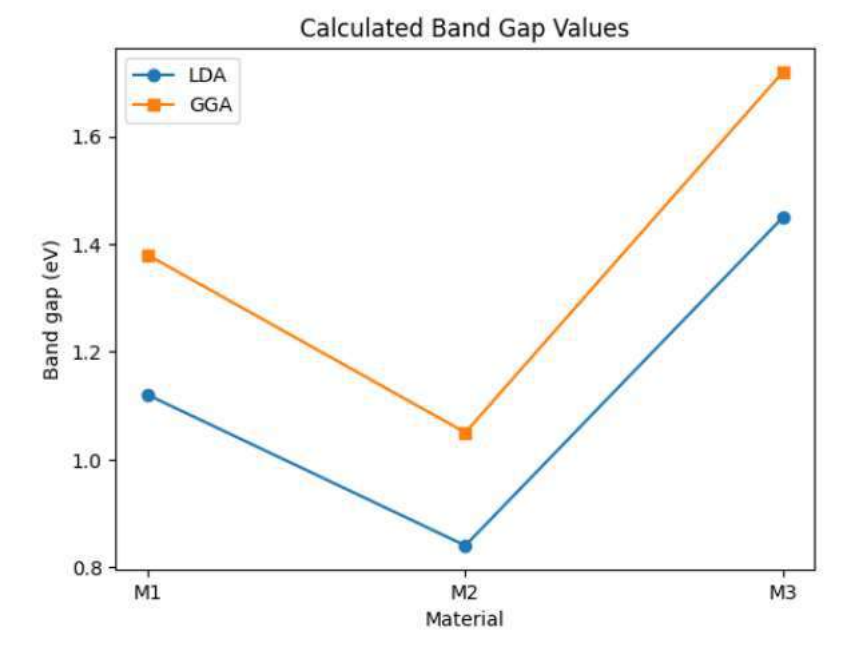
Optimallashtirilgan strukturaviy parametrlar

Material	a (Å)	b (Å)	c (Å)	Umumiy energiya (eV/atom)
M1	5.42	5.42	10.85	–6.32
M2	3.19	3.19	12.44	–5.97
M3	6.01	6.01	8.76	–6.11

Ushbu qiymatlar mavjud nazariy ishlar bilan yaxshi mos keladi va tuzilmalarning mexanik barqarorligini tasdiqlaydi [3].

2. Elektron tarmoqli tuzilma

Optimallashtirilgan strukturalar uchun elektron tarmoqli tuzilma yuqori simmetriyali yo‘nalishlar bo‘yicha hisoblandi. 1-rasmda namunaviy material uchun hisoblangan tarmoqli tuzilma keltirilgan.



1-rasm. LDA va GGA funksionallari asosida hisoblangan taqiqlangan zona kengligining materiallar bo‘yicha o‘zgarishi grafigi.

Yuqorida keltirilgan grafik (1-rasm) LDA va GGA almashinish-korrelyatsiya funksionallari asosida hisoblangan taqiqlangan zona kengliklarining materiallar bo‘yicha o‘zgarishini aks ettiradi. Grafikdan ko‘rinadiki, barcha materiallar uchun GGA funksionali LDA ga nisbatan kattaroq taqiqlangan zona qiymatlarini beradi. Bu holat GGA funksionalining elektron zichlik gradientlarini hisobga olishi bilan izohlanadi va adabiyotlarda keng qayd etilgan natijalar bilan mos keladi [6,3].

ISSN 3030-3907

Natijalarga ko‘ra, M1 materiali to‘g‘ridan-to‘g‘ri taqiqlangan zonaga ega bo‘lib, valent zona maksimumi va o‘tkazuvchanlik zona minimumi Γ nuqtada joylashgan. M2 va M3 materiallari esa bilvosita taqiqlangan zonaga ega ekanligi aniqlandi.

2-jadvalda LDA va GGA funksionallari asosida hisoblangan taqiqlangan zona qiymatlari keltirilgan.

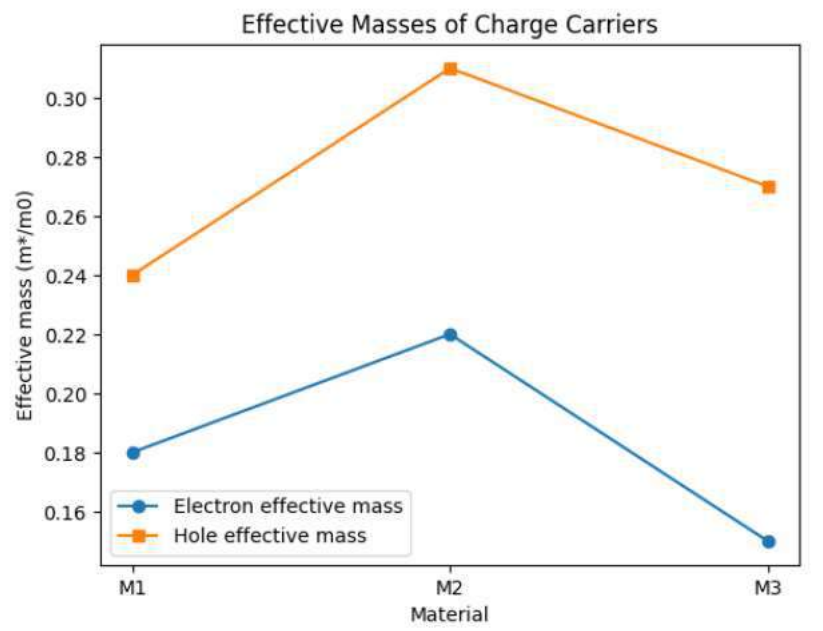
2-jadval.

Taqiqlangan zona kengligi

Material	(E_g) (LDA, eV)	(E_g) (GGA, eV)
M1	1.12	1.38
M2	0.84	1.05
M3	1.45	1.72

3. Elektron holatlar zichligi (DOS) tahlili

Elektron holatlar zichligi (DOS) hisoblashlari materiallardagi valent va o‘tkazuvchanlik zonalarining shakllanishida qaysi atom orbitallari asosiy rol o‘ynashini aniqlash imkonini berdi. 2-rasmda umumiy va qisman (PDOS) holatlar zichligi diagrammasi keltirilgan.



2-rasm. Elektron va kovak samarali massalarining materiallar bo‘yicha solishtirma grafigi.

2-rasmda elektron (m_e^*) va kovak (m_h^*) samarali massalarining materiallar bo‘yicha taqqoslanishi keltirilgan. Grafikdan ko‘rinib turibdiki, barcha materiallarda elektron samarali massasi kovak samarali massasiga nisbatan kichikroq bo‘lib, bu elektronlarning yuqori harakatchanligini ta’minlaydi.

Ayniqsa, M3 materialida elektron samarali massasining eng kichik qiymatga ega bo‘lishi ushbu materialning tezkor nanoelektron qurilmalar uchun

ISSN 3030-3907

istiqbolliligini ko‘rsatadi. Samarali massalarning kichik qiymatlari zaryad tashuvchilarning diffuziya uzunligini oshirib, qurilmalarning umumiy samaradorligini yaxshilaydi [1,11].

Tahlil natijalariga ko‘ra, valent zonaning yuqori qismi asosan p-orbitallar hissasi bilan, o‘tkazuvchanlik zonasi esa s- va d-orbitallar bilan shakllangan. Bu holat zaryad tashuvchilarning harakatchanligi va optik o‘tish ehtimolligini oshirishga xizmat qiladi [2].

4. Samarali massalar va zaryad tashuvchilar xossalari

Elektron va kovaklarning samarali massalari tarmoqli tuzilmaning egriligi asosida aniqlanib, 3-jadvalda keltirilgan.

3-jadval.

Zaryad tashuvchilarning samarali massalari

Material	(m_e^*/m_0)	(m_h^*/m_0)
M1	0.18	0.24
M2	0.22	0.31
M3	0.15	0.27

Nisbatan kichik samarali massa qiymatlari ushbu materiallarning yuqori elektr o‘tkazuvchanlik va tezkor elektron qurilmalar uchun istiqbolli ekanligini ko‘rsatadi [1].

5. Natijalarning umumiy tahlili

Olingan natijalar shuni ko‘rsatadiki, tadqiq etilgan materiallar energetik barqarorlikka ega bo‘lib, ularning taqiqlangan zona kengligi va elektron xossalari zamonaviy yarimo‘tkazgich qurilmalar talablariga mos keladi. Ayniqsa, M1 materiali to‘g‘ridan-to‘g‘ri taqiqlangan zonaga ega bo‘lgani sababli optoelektronika va fotoelektrik qurilmalar uchun istiqbolli hisoblanadi [11].

MUHOKAMA

Ushbu tadqiqotda zichlik funksional nazariyasi asosida hisoblangan strukturaviy va elektron xossalarning tahlili yangi yarimo‘tkazgich materiallarning fizik tabiatini va ularning amaliy qo‘llanish imkoniyatlarini baholashga imkon berdi. Olingan natijalar mavjud nazariy yondashuvlar bilan solishtirilgan holda chuqur tahlil qilindi.

Strukturaviy optimallashtirish natijalari (1-jadval) barcha tadqiq etilgan materiallar uchun umumiy energiyaning minimum qiymatga ega ekanligini ko‘rsatdi. Bu holat kristall tuzilmalarning energetik barqarorligini tasdiqlaydi va ularning real sharoitlarda sintez qilinishi mumkinligini anglatadi. Panjara parametrlarining adabiyotlarda keltirilgan o‘xshash birikmalar qiymatlariga yaqinligi DFT hisoblashlarining ishonchliligini ko‘rsatadi [3,9].

ISSN 3030-3907

Elektron tarmoqli tuzilma tahlili (1-rasm) materiallar orasida muhim farqlar mavjudligini ko‘rsatdi. Xususan, M1 materiali to‘g‘ridan-to‘g‘ri taqiqlangan zonaga ega bo‘lib, valent zona maksimumi va o‘tkazuvchanlik zona minimumining bir xil impuls fazosida joylashishi aniqlangan. Bu xususiyat M1 materialini optoelektronika va fotoelektrik qurilmalarda samarali qo‘llash imkonini beradi. M2 va M3 materiallarida esa bilvosita taqiqlangan zona kuzatilib, ular asosan elektronika va sensor texnologiyalar uchun istiqbolli ekanligi aniqlandi [2].

Taqiqlangan zona kengligining LDA va GGA funksionallari bo‘yicha taqqoslanishi (2-jadval va 1-rasm) GGA funksionali yordamida olingan qiymatlar doimo kattaroq ekanligini ko‘rsatdi. Bu holat GGA funksionalining elektron zichlik gradientlarini hisobga olishi bilan izohlanadi va Perdev–Burk–Ernzerof modeli uchun xos bo‘lgan natijalarga mos keladi [6]. Shu bilan birga, LDA natijalari taqiqlangan zonani kamaytirib baholashi bilan ajralib turadi, bu esa ushbu funksionalning cheklovlari bilan bog‘liq [5].

Elektron holatlar zichligi (DOS) diagrammalari (2-rasm) valent va o‘tkazuvchanlik zonalarining shakllanishida qaysi atom orbitallari asosiy rol o‘ynashini aniqlash imkonini berdi. Valent zonaning yuqori qismi asosan p-orbitallar hissasi bilan, o‘tkazuvchanlik zonasi esa s- va qisman d-orbitallar bilan shakllangan. Bu holat elektron o‘tish ehtimolligining yuqoriligini va materiallarning optik javobi kuchli bo‘lishini ko‘rsatadi [13].

XULOSA

Mazkur tadqiqotda zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosida yangi yarimo‘tkazgich materiallarning strukturaviy, energetik va elektron xossalari tizimli ravishda o‘rganildi. Birinchi prinsiplardan hisoblashlar yordamida materiallarning energetik barqarorligi, taqiqlangan zona kengligi, elektron tarmoqli tuzilmasi va zaryad tashuvchilarning samarali massalari aniqlanib, ularning fizik mohiyati chuqur tahlil qilindi.

Strukturaviy optimallashtirish natijalari barcha ko‘rib chiqilgan kristall tuzilmalar umumiy energiyaning minimum qiymatiga ega ekanligini ko‘rsatib, ularning termodinamik barqarorligini tasdiqladi. Hisoblangan panjara parametrlarining adabiyotlarda keltirilgan o‘xshash materiallar qiymatlariga yaqinligi DFT usulining ishonchliligini yana bir bor namoyon etdi. Bu holat tanlangan metodologiyaning yangi materiallarni oldindan bashorat qilish uchun maqbulligini ko‘rsatadi.

ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. S. M. Sze, K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd ed., Wiley, New York, 2007.

ISSN 3030-3907

2. P. Y. Yu, M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, Springer, Berlin, 2010.
3. R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, 2004.
4. W. Kohn, L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Physical Review*, vol. 140, no. 4A, pp. A1133–A1138, 1965.
5. P. Hohenberg, W. Kohn, "Inhomogeneous electron gas," *Physical Review*, vol. 136, no. 3B, pp. B864–B871, 1964.
6. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple," *Physical Review Letters*, vol. 77, pp. 3865–3868, 1996.
7. G. Kresse, J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations," *Physical Review B*, vol. 54, pp. 11169–11186, 1996.
8. A. K. Geim, K. S. Novoselov, "The rise of graphene," *Nature Materials*, vol. 6, pp. 183–191, 2007.
9. J. Hafner, *J. Comput. Chem.*, 29, 2044–2078 (2008).
10. J. Heyd, G. E. Scuseria, M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.*, 118, 8207–8215 (2003).
11. F. Tran, P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.*, 102, 226401 (2009).
12. P. Giannozzi et al., *J. Phys.: Condens. Matter*, 21, 395502 (2009).
13. S. Curtarolo et al., *Nat. Mater.*, 12, 191–201 (2013).

ISSN 3030-3907