

FİZİKA

UOT 53.087/.088

MƏMMƏD HÜSEYNƏLİYEV¹, HƏMZƏ SEYİDLİ²**YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ KRİTİK NÖQTƏLƏRİN MÜXTƏLİF HALLARI
ÜÇÜN KOMPLEKS DİELEKTRİK FUNKSİYASININ ENERJİDƏN ASILILIQ
ƏYRİLƏRİNİN KORRELYASIYA ƏMSALI ƏSASINDA MÜQAYİSƏSİ**

İşdə kritik nöqtələrin müxtəlif halları üçün kompleks dielektrik funksiyasının ikinci tərtib törəmələrinin enerjiden asılılıq əyrilərinin korrelyasiya əmsalı əsasında müqayisəli təhlili verilmişdir. Bu məqsədlə "Graphical analysis" proqramından istifadə etməklə halına uyğun 100%-li fittingi mümkün olan eksperimental $d^2\varepsilon_1(E)/dE^2$ və $d^2\varepsilon_2(E)/dE^2$ əyriləri qurulmuş və həmin asılılıqların m-in digər qiymətləri ilə fittingi aparılaraq alınan əyrilərin korrelyasiya əmsalları hesablanmışdır.

Müəyyən edilmişdir ki, kritik nöqtələrin dörd müxtəlif halları üçün yerinə yetirilən fitting asılılıq əyriləri bir-birlərindən az fərqlənirlər.

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

Yarımkeçiricilər fizikasında yarımkeçiricinin kritik nöqtələrinin təyini əsas məsələdir. Spektroskopik ellipsometriya ölçmələri bu nöqtələri təyin etməyə imkan verən tədqiqat üsullarından biridir.

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 asılılığı şəklində rəqəmsal olaraq koordinatlarla verilmiş olur və ona görə də bu asılılığı 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. Ona görə ki, əvvəla bu proqramla koordinatlarla verilmiş eksperimental əyri qurmaq mümkündür. Bu asılılığın birinci, ikinci tərtib törəmələrini çox asanlıqla almaq mümkündür və nəhayət həmin 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 $\varepsilon(\omega)$ -nın ikinci tərtib törəmələrinin həqiqi və xəyali hissələri üçün aldığımız 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.

Bu proqramın üstünlükləri barədə əvvəlki işlərimizdə məlumat verilmişdir [4, 5].

Bu məqalədə yarımkeçiricilərdə kritik nöqtələrin müxtəlif halları üçün (dörd halı üçün) kompleks dielektrik funksiyasının enerjiden asılılıq qiymətlərinin korrelyasiya əmsalı əsasında müqayisəli təhlili verilmişdir.

Məsələnin qoyuluşu

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

$$\varepsilon(\omega) = C - Ae^{i\theta}(\omega - E + i\Gamma)^m \quad (1)$$

burada A – amplituda, E – kritik nöqtə, Γ – genişlənmə, $-\theta$ isə eksiton faza bucağıdır.

İfadəyə daxil olan m kəmiyyəti dörd müxtəlif qiymət ala bilər: $m = \frac{1}{2}$ kritik nöqtənin üçölçü (3D) halına aiddir; $m = 0$ kritik nöqtənin ikiölçü (2D) halına aiddir; $m = -\frac{1}{2}$ kritik nöqtənin birölçü (1D) halına aiddir; $m = -1$ isə eksiton tip kritik nöqtədir [8]. $m = 0$ halı üçün (1) ifadəsi aşağıdakı kimi olur:

$$\varepsilon(\omega) = C - Ae^{i\theta} \ln(\omega - E + i\Gamma) \quad (2)$$

Lakin (1) və (2) funksiyalarına daxil olan parametrləri təyin etmək üçün (eləcə də C parametrini aradan qaldırmaq üçün) $\varepsilon(\omega)$ dielektrik funksiyasının eksperimental qiymətlərinin ikinci tərtib diferensiasıllanmasından alınan $\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2}$ funksiyasından istifadə etmək lazım gəlir.

Bu halda (1) və (2) funksiyalarının ikinci tərtib törəmələri $m \neq 0$ halı üçün

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = -m(m-1)Ae^{i\theta}(\omega - E + i\Gamma)^{m-2} \quad (3)$$

və ya triqonometrik formada yazsaq

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = A^1(\Omega)^{m-2/2} \left\{ \cos \left[(m-2) \arg \cos \left(\frac{\omega - E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] + i \sin \left[(m-2) \arg \sin \left(\frac{\omega - E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] \right\} \quad (4)$$

olacaqdır, burada $A^1 = -m(m-1)A$ və $\Omega = (\omega - E)^2 + \Gamma^2$.

$m = 0$ halı üçün

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = Ae^{i\theta}(\omega - E + i\Gamma)^{-2} \quad (5)$$

və triqonometrik formada

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = \frac{A}{\Omega} \left\{ \cos \left[-2 \arg \cos \left(\frac{\omega - E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] + i \sin \left[-2 \arg \sin \left(\frac{\omega - E}{\Omega^{1/2}} \right) + \theta \right] \right\} \quad (6)$$

Fitting apararkən triqonometrik formada yazılmış (4) ($m \neq 0$ olduqda) və ya (6) ($m = 0$ olduqda) funksiyasının həqiqi $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və xəyali $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ komponentləri istifadə olunur. A , E , Γ və θ – parametrləri (4) və (6) funksiyalarının gedişinə aşağıdakı kimi təsir göstərir:

A parametri $d^2\varepsilon_1(E)/dE^2$ və $d^2\varepsilon_2(E)/dE^2$ asılılıqlarının qarşılıqlı vəziyyətinə, onların fiksə olduğu yerə və maksimumların yarım eninə təsir göstərmir, yalnız asılılığın amplitudasına təsir edir. A parametri artdıqca amplitud da artır.

E (kritik nöqtə) parametri də $d^2\varepsilon_1(E)/dE^2$ və $d^2\varepsilon_2(E)/dE^2$ asılılıqlarının qarşılıqlı vəziyyətinə, maksimumların qiymətinə və yarım eninə heç bir təsir göstərmir, yalnız bu asılılıqları absis oxu (enerji) boyunca sürüşdürür və enerjinin verilmiş qiymətinə uyğun yerdə fiksə olunur.

Γ (genişlənmə) parametri də kompleks dielektrik funksiyasının həqiqi və xəyali hissələrinin ikinci tərtib törəmələrinin enerjiden asılılıqlarının qarşılıqlı vəziyyətinə, onların fiksə olunduğu yerə heç bir təsir göstərmir. Adından da göründüyü kimi bu parametr asılılıqlardakı maksimumların yarım eninin dəyişməsinə səbəb olur. Bundan başqa G həm də maksimumların boyuna təsir edir. Γ artdıqca amplitud azalır.

θ (faza) parametrinin dəyişməsi maksimumların qiymətinə, onların yarım eninə və fiksə olunduğu yerə təsir göstərmir. Lakin bu parametr nəinki $d^2\varepsilon_1(E)/dE^2$ və $d^2\varepsilon_2(E)/dE^2$ asılılıqlarının qarşılıqlı vəziyyətinə birbaşa təsir göstərir, həm də onların formalarını tamamilə dəyişdirir. Ona görə də (4) və (6) analitik nəzəri funksiyalarla fitting aparılarkən ilk növbədə onların θ (faza) parametrinə uyğun forma dəyişikliklərinə görə müqayisəsi aparılmalıdır.

Nəticələr və onların müzakirəsi. m -parametrinin nəzəri funksiyanın gedisinə təsiri.

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 üçün 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 (orta kvadratik xəta) göstəricisi ilə qiymətləndirilir.

m -in müxtəlif qiymətləri ilə aparılan fittinglər bir-birilərindən nə qədər xəta ilə fərqlənirlər?

[9] işində bu suala cavab vermək üçün xüsusi olaraq $m = 0$ halına uyğun 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 xətalrı qiymətləndirilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, m -in müxtəlif qiymətlərində A , E , Γ və θ -parametrlərindən yalnız 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.

Lakin RMSE xətası [10] işində də göstərildiyi kimi daha çox mütləq xəta göstəricisi olduğundan, m -in müxtəlif qiymətləri üçün fittingin qiymətləndirilməsində korrelyasiya əmsalından istifadə olunmağı daha məqsədəuyğundur.

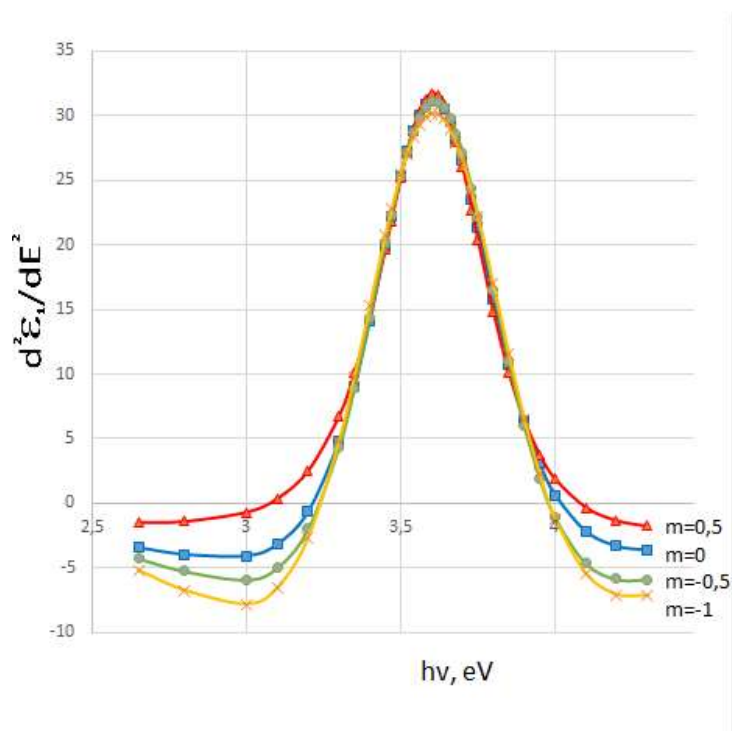
Ona görə də, m -in $m = \frac{1}{2}$, $m = -\frac{1}{2}$ və $m = -1$ halları üçün alınan qiymətləri xüsusi olaraq seçilmiş 100%-li fittingi mümkün olan $m = 0$ qiymətləri ilə müqayisə olunaraq onlar üçün korrelyasiya əmsalları hesablanmışdır.

Korrelyasiya əmsalı aşağıdakı düsturla hesablanır:

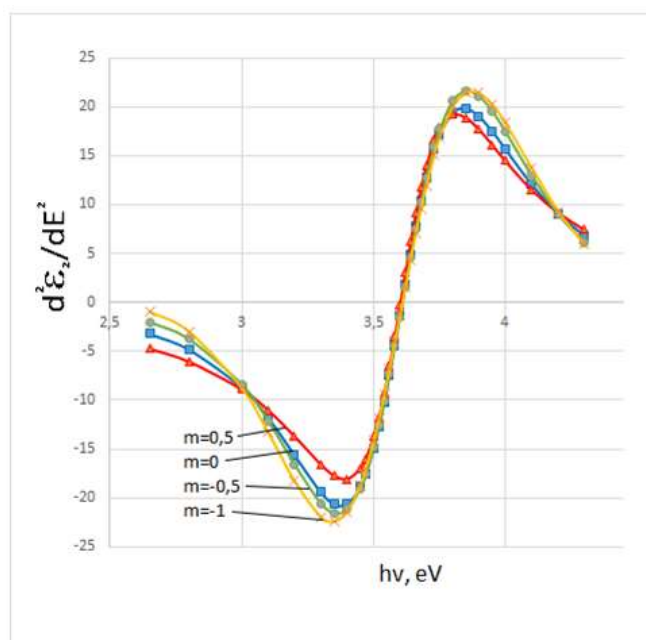
$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=0}^n (X_{0i} - X_{0i,orta})(Y_{mi} - Y_{mi,orta})}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (X_{0i} - X_{0i,orta})^2 \sum_{i=0}^n (Y_{mi} - Y_{mi,orta})^2}} \quad (2)$$

Bu düsturda $m = 0$ halına uyğun koordinatlar X_{0i} -ilə, $m \neq 0$ halına uyğun koordinatlar isə Y_{mi} ilə işarə olunmuşlar. Düstura daxil olan $X_{0i,orta}$ və $Y_{mi,orta}$ ifadələri isə uyğun olaraq X_{0i} və Y_{mi} koordinatlarının orta qiymətləridir.

Qeyd etmək lazımdır ki, hər hansı iki funksiya arasında uyğunluq dərəcəsini korrelyasiya əmsalı vasitəsilə təyin etmək üçün hər iki asılılığı EXCEL proqramına köçürmək, "KOPPEJT" funksiyasını seçmək və bu asılılıqların qiymətlərini "KOPPEJT" funksiyasının iki massivinə yerləşdirmək lazımdır. Bütün bunların nəticəsində korrelyasiya əmsalı avtomatik hesablanmış olacaqdır.



Şəkil 1. “Graphical analysis” proqramı əsasında m -in müxtəlif qiymətləri üçün kompleks dielektrik funksiyasının həqiqi hissəsinin ikinci tərtib törəməsinin enerjiden asılılıq ayrılması (fittinglər $m=0$ halı ilə müqayisədə aparılmışdır).



Şəkil 2. “Graphical analysis” proqramı əsasında m -in müxtəlif qiymətləri üçün kompleks dielektrik funksiyasının xəyali hissəsinin ikinci tərtib törəməsinin enerjiden asılılıq ayrılması (fittinglər $m=0$ halı ilə müqayisədə aparılmışdır).

Cədvəl 1

m	$m = 0$	$m = -1$	$m = -\frac{1}{2}$	$m = \frac{1}{2}$
Korrelyasiya əmsalı (həqiqi hissə)	1	0,996403	0,999085	0,997817
Korrelyasiya əmsalı (xəyali hissə)	1	0,997352	0,998922	0,997352

Cədvəl 1-də “Graphical analysis” proqramı əsasında aparılmış fitting nəticəsində m -in müxtəlif qiymətləri üçün kompleks dielektrik funksiyasının həqiqi və xəyali hissələrinin ikinci tərtib törəmələrinin enerjiden asılılıq ayrılmasının koordinatlarının $m=0$ halı ilə müqayisədə hesablanmış korrelyasiya əmsalları göstərilmişdir.

Korrelyasiya əmsalı üçün alınan bu qiymətlər müqayisə olunan dörd funksiyanın uyğunluq dərəcələrinin xeyli yüksək olmasının göstəricisidir, çünki yaxşı uyğunluq üçün korrelyasiya əmsalının 0,95-dən böyük olması kifayətdir.

Ən böyük xəta üçölçülü (3D) halı ilə $m=-1$ (eksiton tip kritik nöqtə) halları arasında olmuşdur ki, bu halda korrelyasiya əmsalı $r_{xy}=0,990177$ olmuşdur ki, bu göstərici də $r_{xy}=0,95$ qiymətindən xeyli böyükdür.

Beləliklə, müəyyən edilmişdir ki, kritik nöqtələrin dörd müxtəlif halları üçün yerinə yetirilən fitting asılılıq ayrılıqları bir-birilərdən az fərqlənirlər.

ƏDƏBİYYAT

1. León M., Serna R., Levchenko S., Nateprov A., Nicorici A., Merino J.M., Arushanov E. Modeling the optical constants of $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$ and CuGa_3Se_5 crystals // J. Appl. Phys., 2007, v. 101, p. 013524.
2. Corana M., Marchesi C., Martini, Ridella, S. Minimizing multimodal functions of continuous variables with the “Simulated annealing” algorithm // ACM Transactions on Mathematical Software, 1987, v. 13, № 3, pp. 262-280.
3. Кардона М. Модуляционная спектроскопия. Москва: Мир, 1972, 416 с.
4. Hüseynəliyev M.H., Əhmədov O.R., Abdullayeva N.M., Xəlilova X.N., Qasimov N.A. Spektroskopik ellipsometriya ölçmələrinin tədqiqində “Graphical analysis” proqramının tətbiqinin üstünlükləri // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, 2015, № 5, s. 100-103.
5. Hüseynəliyev M.H. Qurğuşun sulfid monokristallarının dielektrik xassələri və kritik nöqtələrinin təyini // AMEA Naxçıvan Bölməsinin Xəbərləri, 2016, № 4, s. 240-246.
6. Albornoz J.G., Serna R., Leon M. Optical properties and electronic structure of polycrystalline $\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x\text{InSe}_2$ alloys // J. Appl. Phys., 2005, v. 97, pp. 103515 (1-7).
7. Choi S.G., Zhao H.Y., Persson C. Dielectric function spectra and critical point energies of $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ from 0,5 to 9,0 eV // J. Appl. Phys., 2012, v. 111, pp.033506 (1-6).
8. Lautenschlager P., Garriga M., Logothetidis S., Cardona M. Interband critical points of GaAs and their temperature dependence // Phys. Rev., 1987, v. 35, p. 9174.
9. Hüseynəliyev M.H. Yarımkeçiricilərdə kritik nöqtələrin müxtəlif halları üçün kompleks dielektrik funksiyasının spektral asılılıqlarının müqayisəsi / Həsən Abdullayevin 100 illik yubileyinə həsr olunan “Kondensə olunmuş hal fizikasının müasir tendensiyası (MT CMP 2018)” mövzusunda beynəlxalq konfrans. AJP Fizika, v. 14, № 3, sec. Az, pp. 101-103.

10. Hüseynəliyev M.H. Spektroskopik ellipsometriya ölçmələrinin analizində korrelyasiya əmsalından istifadə etməyin üstünlükləri // AMEA Naxçıvan Bölməsinin Xəbərləri. Təbiət və texniki elmlər seriyası, 2020, c. 16, № 4, s. 224-228.

¹AMEA Naxçıvan Bölməsi

E-mail: mamedhuss@mail.ru

²Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

E-mail: seyidlihamza@mail.ru

Mammad Huseynaliyev, Hamza Seyidli

COMPARISON OF DEPENDENCE CURVES OF THE COMPLEX DIELECTRIC FUNCTION ON THE ENERGY FOR DIFFERENT STATES OF THE CRITICAL POINTS IN SEMICONDUCTORS BASED ON THE CORRELATION COEFFICIENT

The paper provides a comparative analysis of the curves of the second derivatives of the complex dielectric function of energy for different cases of critical points based on the correlation coefficient. For this purpose, using the “Graphical analysis” software for cases experimental curves and with 100% fitting were constructed and the correlation coefficients of the curves obtained by approximating these dependences with other values of m were calculated.

It was found that the curves of approximation of the dependences, performed for four different cases of critical points, differ little from each other.

Keywords: semiconductor, critical point, “Graphical analysis”, fitting, complex dielectric function, real part, imaginary part, parameter, RMSE, correlation coefficient.

Мамед Гусейналиев, Гамза Сейидли

СРАВНЕНИЕ КРИВЫХ ЗАВИСИМОСТИ КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ОТ ЭНЕРГИИ ДЛЯ РАЗНЫХ СОСТОЯНИЙ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК В ПОЛУПРОВОДНИКАХ НА ОСНОВЕ КОЭФФИЦИЕНТА КОРРЕЛЯЦИИ

В данной работе дается сравнительный анализ кривых зависимости вторых производных комплексной диэлектрической функции от энергии для различных случаев критических точек на основе коэффициента корреляции. Для этого с помощью программы «Graphical analysis» для случая построены экспериментальные кривые и со 100% подгонкой и рассчитаны коэффициенты корреляции кривых, полученных путем аппроксимации этих зависимостей другими значениями m .

Установлено, что кривые аппроксимации зависимостей, выполненные для четырех различных случаев критических точек, мало отличаются друг от друга.

Ключевые слова: полупроводник, критическая точка, «Graphical analysis», фиттинг, комплексная диэлектрическая функция, действительная часть, мнимая часть, параметр, RMSE, коэффициент корреляции.

(AMEA-nın müxbir üzvü Vəli Hüseynov tərəfindən təqdim edilmişdir)

Daxilolma tarixi: İlkin variant: 20.05.2021

Son variant: 21.06.2021