

**ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ  
ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.30.05.2018.FM./Т.34.01  
РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**  

---

**НАМАНГАН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ**

**ИНОЯТОВ ШУКУРИЛЛО ТУРҒУНБОЕВИЧ**

**КИЧИК ЎЛЧАМЛИ ЯРИМЎТКАЗГИЧЛИ ГЕТЕРОСТРУКТУРАЛАРДА  
КАТТА РАДИУСЛИ ЭКСИТОНЛАР ВА ПОЛЯРОНЛАР**

**01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

**Тошкент – 2019**

**фалсафа доктори (PhD) диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации  
доктора философии (PhD)**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)**

**Иноятв Шукурилло Турғунбоевич**

Кичик ўлчамли яримўтказгичли гетероструктураларда катта радиусли  
экситонлар ва поляронлар ..... 3

**Иноятв Шукурилло Турғунбоевич**

Полярони и экситоны большого радиуса в низкоразмерных  
полупроводниковых гетероструктурах ..... 19

**Inoyatov Shukurillo Turgunboyevich**

Large-radius polarons and excitons in low-dimensional semiconductor  
heterostructures ..... 35

**Эълон қилинган ишлар рўйхати**

Список опубликованных работ  
List of published works ..... 39

**ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ  
ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.30.05.2018.FM./Т.34.01  
РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**  

---

**НАМАНГАН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ**

**ИНОЯТОВ ШУКУРИЛЛО ТУРҒУНБОЕВИЧ**

**КИЧИК ЎЛЧАМЛИ ЯРИМЎТКАЗГИЧЛИ ГЕТЕРОСТРУКТУРАЛАРДА  
КАТТА РАДИУСЛИ ЭКСИТОНЛАР ВА ПОЛЯРОНЛАР**

**01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

**Тошкент – 2019**

**Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2019.1.PhD/FM318 рақам билан рўйхатга олинган.**

Диссертацияси Наманган давлат университетида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгашнинг веб-саҳифасида ([www.fti.uz](http://www.fti.uz)) ва «ZiyoNet» Ахборот-таълим порталида ([www.ziyounet.uz](http://www.ziyounet.uz)) жойлаштирилган.

**Илмий раҳбар:**

**Гулямов Абдурасул Гафурович**  
физика-математика фанлари доктори

**Расмий оппонентлар:**

**Разиков Тахирджон Муталович**  
физика-математика фанлари доктори, профессор

**Расулов Рустам Явкачович**  
физика-математика фанлари доктори, профессор

**Етакчи ташкилот:**

**Тошкент ахборот технологиялари университети**

Диссертация ҳимояси Физика-техника институти ҳузуридаги DSc.30.05.2018.FM./T.34.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2019 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ соат \_\_\_ даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100084, Тошкент шаҳри, Чингиз Айтматов кўчаси, 2Б-уй. Тел./факс: (99871) 235-42-91, e-mail:ftikans@uzsci.net, Физика-техника институти мажлислар зали).

Диссертация билан Физика-техника институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (\_\_\_ рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 100084, Тошкент шаҳри, Чингиз Айтматов кўчаси, 2Б-уй, Физика-техника институти. Тел/факс: (99871) 235-30-41.

Диссертация автореферати 2019 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ куни тарқатилди.

(2019 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ даги \_\_\_ рақамли реестр баённомаси).

**Н.Р. Авезова**

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш раиси, т.ф.д. етакчи илмий ходим

**А.Г. Комилов**

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш илмий котиби, т.ф.н.

**А.В. Каримов**

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш қошидаги илмий семинар раиси, ф.-м.ф.д., профессор

## **КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)**

**Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати.** Ҳозирги кунда жаҳонда яримўтказгич материаллар асосидаги наноўлчамли объектлар физикасини ўрганиш ва шу аснода янги авлод электрон асбобларини яратиш ҳамда уларнинг характеристикаларини такомиллаштириш истиқболли йўналишлардан бири бўлиб, ушбу соҳадаги тадқиқотлар ҳажми кескин ортиб бормоқда. Наноўлчамли объектлар ва улар асосидаги асбоблар олиниши асосан лаборатория шароитида молекуляр-нурли эпитаксия технологияси муваффақиятлари билан боғлиқ бўлиб, ҳозирги кунда ноёб хусусиятларга эга бўлган яримўтказгичлар юпқа қатламларини яратиш имконияти мавжуд. Айни пайтда қатлам қалинлиги нанометр тартибидаги гетероструктураларнинг энергиясини ҳисоблаш бўйича назарий моделларни яратиш ва уларнинг энергия спектрларини тадқиқ қилиш каби назарий масалалар физиканинг долзарб вазифаларидан ҳисобланади.

Бугунги кунда жаҳонда гетероструктуралар асосида терагерцли диапазонларда ишлай оладиган тезкор транзисторлар, қисқа-тўлқинли квант каскадли лазерлар, резонанс-туннел диодлар ва детекторлар, оптик модуляторлар, фотоприемниклар ва бошқа кўплаб янги авлод электрон асбобларни яратишга эътибор қаратилмоқда. Шу сабабли кичик ўлчамли яримўтказгичли гетероструктураларда заряд ташувчиларнинг энергия спектрларини ҳажмий гетероструктураларга нисбатан бир неча марта ортиши туфайли, янгидан янги ҳосил бўладиган квант эффектларни очиб бериши, кичик ўлчамли яримўтказгичли асбоблар физикасининг муҳим масалаларидан бири ҳисобланади.

Республикамизда илм-фан ривожига, жумладан яримўтказгичли асбоблар физикаси ва электроника соҳасини ривожлантиришга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Бу борада мамлакатимиз олимлари томонидан янги яримўтказгич материаллар, улар асосида турли тузилмалар олиш ва уларнинг характеристикаларига ташқи омиллар таъсирларини ўрганиш бўйича муҳим натижалар олинган. Ўзбекистон Республикасини 2017-2021 йилларда янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегиясида илмий - тадқиқот ва инновацион фаолиятни рағбатлантириш, энергия тежамкор технологияларни ишлаб чиқиш, қайта тикланувчан энергия манбаларидан фойдаланишни кенгайтириш вазифалари белгилаб берилган. Бу борада турли ташқи таъсирларга чидамли янги электрон техника материаллари ва улар асосидаги структураларни ишлаб чиқиш ҳамда уларнинг параметрларини назорат қилишнинг самарали усулларини яратиш муҳим масалалардан ҳисобланади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2019 йил 30 майдаги ПҚ-4348-сонли «Электротехника саноатини ривожлантириш учун қулай шарт-шароитлар яратиш ва тармоқнинг инвестициявий ҳамда экспорт салоҳиятини ошириш бўйича қўшимча чора-тадбирлар тўғрисида», 2018 йил 14 июлдаги ПҚ-3855-сонли «Илмий ва илмий-техникавий фаолият натижалари тижоратлаштириш самарадорлигини ошириш бўйича қўшимча чора-тадбирлар

тўғрисидаги» ва 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон «Фанлар Академияси фаолияти, илмий тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида» ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

**Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги.** Мазкур тадқиқот иши Ўзбекистон Республикасининг фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Энергетика, энергия ва ресурс тежамкорлиги, транспорт, машина ва асбобсозлик, замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника ва электрон асбобсозликни ривожлантириш» устувор йўналишига мувофиқ бажарилган.

**Муаммонинг ўрганилганлик даражаси.** Кичик ўлчамли гетероструктураларда электрон, ковак, экситон,  $D^-$  марказ, полярон ёки биполяронлар каби объектларни таҳлил қилиш масаласи – нозиклиги квантомеханик дифференциал тенгламалар системасини ечишга боғлиқ бўлиб, қатор математик қийинчиликлар туғдиради. Квант нуқтадаги экситон масаласини ечиб, энергия функционалини олишда Давыдов А.С. томонидан ҳажмий экситондаги электрон ва ковакнинг аниқ ечими келтирилган, Billaud B., M.Риссо ва Truong T. томонидан 1нм - 15нм радиусли квант ўрадаги натижаларини олган. Бугров В.Е., Константинов О.В. InGaN асосли квант нуқтада (КН) электрон ва ковакнинг корреляциясини ҳисобга олмаган ҳолда система энергиясининг асосий қисмини кулон энергияси ташкил қилишини кўрсатиб беришган. Watanabe K., Fujii M. ва Hayashi S. эса Si-SiO<sub>2</sub> асосли КН да экситон энергиясини  $m_1=0.5m_0$ ,  $m_2=0.5m_0$ ,  $E=8$ ,  $V_1=3.2$ ,  $V_2=4.3$  қийматларда ўзларининг натижаларини тажриба билан солиштирганлар.

Шу сабабли, ушбу масалаларни ўрганишда тақрибий усуллар ишлаб чиқиш ва қулай ҳисоблаш алгоритмларини яратиш ҳам муҳим масалалардан саналган. Бу масалаларни тадқиқ этишда кўп ҳолларда Хартри-Фок усули Екимов А.И., Онушенко А.А. ёки вариацион усул Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А., ундан ташқари Хие W. ҳам қўллаганлар. Маълумки, Хартри-Фок усулида корреляция энергияси ҳисобга олинмайди. Вариацион усулларда эса, фазо бўйича каррали интегралларни ҳисоблаб олиш биринчи ўринга чиқади. Шу сабабли, кўп ҳолларда синов тўлқин функциясини ҳисоблашлар учун қулай қилиб танлаш лозим.

Ҳозирги кунларда, Ўзбекистон олимларидан Гулямов Г. ва Бахадирханов М. ва уларнинг ходимлари томонидан компенсирланган кремнийда (квантланмаган) магнит майдонларда етарлича катта манфий магнитоқаршилиқ кузатилган. Шу билан бирга, Расулов Р. ва унинг шогирдлари томонидан квант нуқталар ҳосил бўлиши механизмлари аниқланган.

Аммо юқорида келтирилган ишларда чекли баландликка эга бўлган гетеробарьерли сферик КН даги экситон учун тўла ва корреляция энергияларини таҳлил қилишда, икки ўлчамли фазода  $D^-$  марказ тўла

энергияси ва электроннинг боғланиш энергияларини Хиллерас координаталари ёрдамида сонли усулда аниқлашда чекли потенциал ўрали сферик квант нуқтада электрон энергиясини поляронли силжишини адиабатик моделда таҳлил қилинмаган, унинг квант нуқта радиусига боғлиқлигини ҳисоблашда вариацион тақрибий ҳисоблаш усулларига эътибор қаратилмаган.

**Тадқиқотнинг диссертация бажарилган олий таълим муассасасидаги илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги.** Диссертация тадқиқоти Наманган давлат университети фундаментал илмий тадқиқотлар режасининг Ф2-ОТ-О-15494 «Квант нуқтали гетеро ва нанотузилмалардаги экситонларни, поляронларни, биполяронларни ва кўчиш ҳодисаларини тадқиқ этиш асосида нурлагичлар, фотоэлементлар ва бошқа турдаги оптоэлектрон асбобларнинг самарадорлигини яхшилаш» (2012-2016 йил) илмий лойиҳаси доирасида бажарилган.

**Тадқиқотнинг мақсади** кичик ўлчамли яримўтказгичли гетероструктураларда катта радиусли экситонлар ва поляронларнинг энергетик характеристикаларини квант нуқта ўлчамига боғлиқлигини ўрганишдан иборат.

**Тадқиқотнинг вазифалари:**

чекли баландликка эга бўлган гетеробарьерли сферик квант нуқтада экситон энергиясини вариацион ҳисоблаш, экситон энергиясининг квант нуқта радиусига боғланишини аниқлаш, натижаларни  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ , ва  $Si-SiO_2$  каби квант нуқталардаги тажрибаларга ва бошқа назарий натижалар билан таққослаш;

икки ўлчамли  $D^-$  марказ тўла энергияси ва электроннинг боғланиш энергияларини аниқлаб, ҳамда фазо ўлчамлари пасайганда уларнинг энергияларини ўзгаришини баҳолаш;

чекли баландликка эга бўлган гетеробарьерли сферик квант нуқтада электрон куйи сатҳининг поляронли силжишини адиабатик ва ноадиабатик усулларда баҳолаш, параболик конфайнмент моделида фононлар координатасини силжиш амплитудаси дифференциал тенгламасини Грин функцияси ёрдамида ечиш;

икки ўлчамли полярон ва биполярон энергиясини вариацион усулда таҳлил қилиш, барқарор биполярон ҳосил бўлиши шароитларини аниқлаш, натижаларни Фейнман ва Ли-Лоу-Пайнс усулида аниқланган маълумотларга солиштириш.

**Тадқиқотнинг объекти** кичик ўлчамли яримўтказгичли гетероструктуралардаги  $D^-$  марказ,  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ ,  $Si-SiO_2$  квант нуқталардаги экситон, икки ўлчамли фазодаги полярон ва биполярондан иборат.

**Тадқиқотнинг предмети** кичик ўлчамли гетероструктураларда ва квант нуқталарда квазизарраларнинг энергиясини квант нуқта радиусига ва квант ўра ўлчамига боғлиқлик жараёнларидан иборат.

**Тадқиқотнинг усуллари.** Тадқиқотда назарий физиканинг тақрибий усуллари; жумладан вариацион ҳисоб, сонли таҳлил, математик моделлаштириш, спектрал Грин функцияси каби усуллар қўлланилган.

**Тадқиқотнинг илмий янгилиги** қуйидагилардан иборат:

илк бор локаллашган сферик квант нуқтада экситон синов тўлқин функциясидаги динамик корреляциясини ҳисобга олиш натижасида  $CdS - SiO_2$ ,  $InGaN - SiO_2$ ,  $Si - SiO_2$  квант нуқталардаги тажрибаларни асослаб берувчи 1-s сатҳ учун энергия функционали аниқланган;

икки ўлчамли фазода  $D^-$  марказ тўла энергияси ва электроннинг боғланиш энергияларини Хиллерас координаталари ёрдамида сонли усулда ҳисобланган, ҳамда  $D^-$  марказ тўла энергияси фазо ўлчами пасайганда ( $3d \rightarrow 2d$ ), энергия нисбати  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$  га тенг бўлиши аниқланган;

чекли потенциал барьерли сферик квант нуқтада аниқланган поляронли силжиш энергиясининг квант нуқта радиусига боғлиқлиги қонуниятида экстремум нуқтаси мавжудлиги кўрсатилган, хусусан квант нуқта радиуси камайиб  $a \approx 3nm$  га етганда кучли конфайнмент ҳолати юзага келиши натижасида поляронли силжиш энергияси максимум қийматга эришиши сўнгра камайиши аниқланган;

квант нуқтадаги полярон масаласини ечишда, ноадиабатик эффектларни ҳисобга олган ҳолда, Грин функциясининг спектрал ёйилмасини ечиш орқали, полярон энергиясини ҳисоблашнинг содда модели ишлаб чиқилган;

илк бор Буймистров-Пекарнинг ноадиабатик усулидаги кучсиз, кучли ва оралик электрон-фонон ўзаро таъсир қийматларида икки ўлчамли полярон тўла энергияси ҳисобланиб, бу натижа бошқа натижаларга нисбатан Фейнманнинг усулида олинган аниқ натижага 98,5% мос келиши кўрсатилган.

**Тадқиқотнинг амалий натижалари** қуйидагилардан иборат:

сферик квант нуқтадаги экситон учун топилган функционал  $CdS - SiO_2$ ,  $InGaN - SiO_2$ ,  $Si - SiO_2$  каби наноструктураларда электрон-ковак кулон энергиясини ва динамик корреляция тузатмасини тақрибан баҳолашга имкон бериши кўрсатилган;

Грин функцияси усулида топилган квант нуқтадаги полярон энергияси функционали бошқа тақрибий усуллардан аниқроқ бўлиб, полярон яримўтказгичли нанозаррада электрон-фонон ўзаро таъсирини таҳлил қилишда фойдаланиш мумкинлиги кўрсатилган.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги** диссертация ишида квант нуқтадаги экситон учун топилган оптик тирқиш  $CdS - SiO_2$ ,  $InGaN - SiO_2$ ,  $Si - SiO_2$  асосидаги квант нуқталардаги тажрибаларга ва бошқа назарий маълумотларга таққосланиб, тақрибан мос келиши, икки ўлчамдаги полярон ва биполярон характеристикалари аниқлик жиҳатдан Фейнман ва Ли-Лоу-Пайнс усулидаги натижалардан деярли фарқ қилмаслиги, вариацион усулдаги ҳисоблашларда тақрибий усуллардан фойдаланиши билан таъминланган.

**Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти яримўтказгичли наноструктуралардаги квази объектларнинг физик хоссалари тўғрисида миқдорий маълумотлар, улар ҳақидаги янги тасаввурларни яратилганлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти яримўтказгичли наноструктуралардаги экситон,  $D^-$  марказ, полярон, биполярон каби объектларининг физик хоссалари ва энергетик спектрларини назарий усулдаги ҳисоб-китобларидан фойдаланган ҳолда наноўлчамли яримўтказгич структуралар олишда фойдаланиш мумкинлиги билан белгиланади.

**Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.** Сферик квант нуқтадаги экситон энергиясини сферик квант нуқта радиусига боғланиш механизмларини ўрганиш асосида:

локаллашган сферик квант нуқтада чекли баландликдаги гетеробарьердаги экситонни 1-с сатҳи вариацион ҳисоблаш усули келтириб чиқарилган бўлиб, ундан Россия Фанлари Академияси Яримўтказгичлар физикаси институти №13-02-00073 «Квантовые точки первого рода с непрямой в пространстве квазиимпульсов структурой зоны проводимости» лойиҳада фойдаланилган (Россия Фанлар Академиясининг Яримўтказгичлар физикаси институтининг 2019 йил 9 июндаги 15507-46-2433-сон маълумотномаси) Илмий натижаларни қўлланилиши квант нуқтада экситон энергиясини квант нуқта радиусига боғлиқ ҳолда ечиш имконини берган;

чекли баландликка эга бўлган гетеробарьерли сферик квант нуқтада экситон энергиясини вариацион ҳисоблашда, Кулон ва корреляция энергияларини таҳлил қилишда олинган натижалар Ф-2-21 рақамли «Яримўтказгич-диэлектрик чегарасидаги сирт ҳолатлар зичлигини аниқлашни математик моделлаштириш» лойиҳада квант ўрада Циклотрон резонанси содир бўлиш жараёнларини тушунтиришда қўлланилган (Ўзбекистон республикаси олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги 2019 йил 15 июндаги 89-03-2489 - сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш кичик ўлчамли  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ , ва  $Si-SiO_2$  квант ўрасидаги электрон транспорт массаси ва тўла концентрациясини аниқлаш имконини берган.

**Тадқиқот натижаларининг апробацияси.** Мазкур тадқиқот иши натижалари 3 та халқаро ва 4 та республика миқёсидаги илмий–амалий анжуманларида муҳокамадан ўтказилган.

**Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги.** Диссертация мавзуси бўйича жами 15 та илмий иш чоп этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 7 та мақола, жумладан 3 та хорижий ва 4 та республика журналларида чоп этилган.

**Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми.** Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, илова ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 22 та расм ва 4 та жадвални ўз ичига олган ҳолда 105 бетни ташкил этади.

## ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Диссертациянинг **кириш** қисмида ушбу тадқиқотнинг долзарблиги ва зарурияти асосланган, тадқиқотнинг мақсади ва вазифалари, объект ва предметлари тавсифланган, фан ва тадқиқот усулларининг диссертация мавзуси билан илмий тадқиқот ишларини боғлиқлиги диссертация иши бажарилган ОТМда аниқланган, ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, натижаларнинг илмий ва амалий аҳамияти очиб берилган, тадқиқот натижаларини амалиётга жорий қилиш, нашр этилган ишлар ва диссертация тузилиши бўйича маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг **«Яримўтказгич гетероструктураларда фазовий квантланиш ва уни квазизарралар хоссаларига таъсири»** деб номланган биринчи бобида хажмий яримўтказгичларда экситонлар, трионлар, адиабатик ва ноадиабатик полярон моделлари,  $D^0$  ва  $D^-$  марказларнинг қисқача маълумотлар ёзилган. Наноструктураларда катта радиусли экситон,  $D^0$  ва  $D^-$  марказлар, полярон масалаларини ўрганиш бўйича хозирга қадар олиб борилган тадқиқотларнинг қисқача мазмуни келтирилган. Хали етарлича ёритилмаган ва ўрганилиши зарур бўлган муҳим масалалар яққол ажратилиб, булар асосида муаммонинг қўйилиши шакллантирилган.

Диссертациянинг **«Кичик ўлчамли яримўтказгич гетероструктураларда катта радиусли экситон ва  $D^-$  марказ характеристикасини вариацион таҳлили»** деб номланган иккинчи бобида Сферик квант нуқтадаги экситон масаласига мос келадиган тўлқин функциясини кўриниши танлаб энергияси ҳисобланган. Электрон ва ковак кулон тортишув энергияси баҳоланган ва бошқа тадқиқотлар натижалари билан таққосланган. Сферик квант нуқтадаги экситон энергияси қуйидагича ҳисобланган. Бу ерда ўлчами тахминан  $50 \div 100$  ангстрем, тақиқланган соҳаси эса  $E_{g1}$  бўлган яримўтказгич заррачаси, тақиқланган соҳаси  $E_{g2}$  ( $E_{g2} > E_{g1}$ ) бўлган яримўтказгич ёки диэлектрик ичида жойлашган бўлади.

Экситон учун гамильтонианни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + V(r_1) + V(r_2), \quad (1)$$

бу ерда  $\Delta_1, \Delta_2$  - электрон ва ковак учун Лаплас оператори, электрон ва ковак учун чекли чуқурликдаги потенциал ўралар учун экситоннинг асосий ҳолат синов тўлқин функцияси қуйидаги кўринишда танланган:

$$\psi = \varphi(r_1)\varphi(r_2), \quad \varphi(r_{12}) = 1, \quad (2)$$

$$\varphi(r_i) = \exp(-\delta_i^2 r_i^2), \quad i=1 \div 2, \quad (3)$$

яъни, бу ерда корреляцион тузатма ҳисобга олинмади. (3) да,  $\delta$  - вариацион параметр,  $r_i$  - электрон (ковак) радиус вектори.

Маълумки, чекли чукурликка эга бўлган сферик квант ўрадаги микрозарра ҳаракати қуйидаги Гамильтониан орқали тавсифланиб:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 + V(r_1), \quad (4)$$

$\Delta_1$  - Лаплас оператори, дискрет энергиянинг аниқ қийматлари  $E_{exact}$  ни эса ушбу трансцендент тенгламадан топилади:

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha \cdot a) = -\beta, \quad (5)$$

бу ерда  $\hbar^2 \alpha^2 / 2m = V_0 + E$  ва  $\hbar^2 \beta^2 / 2m = -E < 0$ .

Иккинчи томондан, (4) энергия операторини  $\varphi(r_i) = \exp(-\delta_i^2 r_i^2)$  базис бўйича ўрта қиймати  $E_{var}$  ни вариацион усулда ҳисоблаш мумкин. Такқослаш учун, қуйидаги 1- жадвалда асосий ҳолат энергиясини аниқ  $E_{exact}$  ва вариацион ҳисобдаги  $E_{var}$  қийматлари келтирилган.

### 1- жадвал

#### Сферик квант ўрадаги заррачанинг аниқ $E_{exact}$ ва вариацион $E_{var}$ энергиялари қийматларини такқослаш

$a, \text{Å}$	$E_{exact}, eV$				$E_{var}, eV$			
	$V_0=0.2eV$		$V_0=2eV$		$V_0=0.2eV$		$V_0=2eV$	
	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$
10	0.0000	-0.1481	-0.9602	-1.9333	0.0000	-1.1457	-0.9421	-1.9169
50	-0.1481	-0.1972	-1.9333	-1.9970	-1.1457	-1.1962	-1.9169	-1.9951
90	-0.1811	-0.1991	-1.9783	-1.9990	-1.1787	-1.1987	-1.9699	-1.9983

Ушбу жадвалдан кўринадики,  $E_{exact}$  ва  $E_{var}$  фарқ унчалик катта эмас. Бу эса,  $\varphi(r_i) = \exp(-\delta_i^2 r_i^2)$  кўринишидаги базис ёрдамида экситон энергиясини тақрибан ҳисоблашга имкон беради. Синов тўлқин функцияси (3) ёрдамида экситон энергияси оператори (1) ни ўрта қийматини ҳисоблаб, қуйидаги функционални топиш мумкин:

$$E_{ex} \{ \mu_1, \mu_2 \} = \langle K_1 \rangle + \langle K_2 \rangle + \langle V_1 \rangle + \langle V_2 \rangle - \langle C \rangle, \quad (6)$$

$K_i, C, V_i$  - лар барчаси диссертацияда аналитик ҳисобланган.

Сонли ҳисоблашларда электрон учун квант ўра чукурлиги  $V_1 = 0.0675 eV$ , эффе́ктив массани  $m_1 = 0.2m_0$ , ковак учун эса,  $V_2 = 0.1575 eV$ ,  $m_2 = m_0$ , диэлектрик сингдирувчанликни  $\varepsilon = 9$  га тенг деб олинди. Бу қийматлар – нитридли  $InGaN$  квант нуқталар учун характерлидир.

Кейинги тадқиқотларда сферик квант нуқтада экситон энергиясининг характеристикаларини ҳисоблаб топилган натижалари  $CdS$  ва  $Si$  асосидаги квант нуқталарда ўтказилган тажрибаларга такқосланган ва уларга тақрибан мос келиши аниқланган. Экситон учун синов тўлқин функцияси қуйидаги кўринишда (корреляцияни ҳисобга олинган ҳолда) танланган:

$$\psi = \varphi(r_1)\varphi(r_2)\varphi(r_{12}) = (\exp(-a r_1^2))(\exp(-b r_2^2))(\exp(-c(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2)). \quad (7)$$

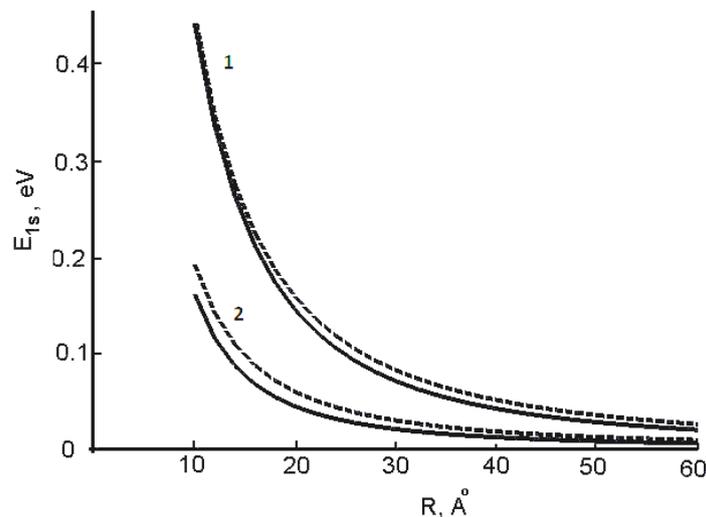
Маълумки, ҳажмий кристалдаги экситонда (конфайнмент йўқ) электрон ва ковак нисбий ҳаракати аниқ ечимга эга бўлиб, экспонента кўринишида бўлади. Танланган синов функцияси (7) даги охириги кўпайтувчи  $\phi(r_{12})$  функционал интегралларни ҳисоблашда жуда қулай бўлиб, экситон энергиясини аниқ қийматига яқин натижа беради, четланиш хатолиги  $\sim 10\%$  атрофида бўлади.

Экситоннинг тўла энергияси функционалини топиш учун, (7) тўлқин функция ёрдамида (1) Гамильтон операторини ўрта қийматини ҳисоблаш керак:

$$J_{ex}\{a, \beta, \gamma\} = \frac{\langle \psi H \psi \rangle}{\langle \psi \psi \rangle}, \quad (8)$$

бу ерда  $a, \beta, \gamma$  – вариацион параметрлар, (8) даги интегралларни ҳисоблаб, экситоннинг тўла энергияси функционалини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$J_{ex}\{\alpha, \beta, \gamma\} = \frac{\hbar^2}{2R^2} \left\{ \frac{1}{m_1} K_1(\alpha, \gamma) + \frac{1}{m_2} K_2(\beta, \gamma) \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} C(\alpha, \beta, \gamma) + \bar{V}_1(\alpha, \beta, \gamma) + \bar{V}_2(\alpha, \beta, \gamma). \quad (9)$$



1.  $V=1\text{eV}$ ,  $m^*=0.5m_0$ , 2.  $V=3\text{eV}$ ,  $m^*=2m_0$

**1- расм. Чекли сферик ўрадаги битта заррачани 1s ҳолат энергиялари: Қуюқ чизик – аниқ ечим, штрихли чизик – гаусс орбитали орқали ҳисобланган вариацион ечим**

***CdS-SiO<sub>2</sub>* асосидаги Квант нуқталар:** Диссертацияда турлича аналитик ва сонли назариялар натижаларини *CdS* (кадмий сульфид) асосидаги квант нуқталарда ўтказилган тажриба билан таққосланган. Қолаверса *CdS* материалнинг параметр қийматлари берилган. Жадвалдаги қийматлардан фойдаланиб чизилган график 2-расмда келтирилган бўлиб, мақоладаги турлича аналитик ва сонли назариялар натижалари ҳамда тажриба маълумотлари билан таққосланган. 2-жавалдаги натижалар 2- расмдаги графикда крест белгисида, тажриба маълумотлари эса учбурчак ва квадрат белгисида кўрсатилган.

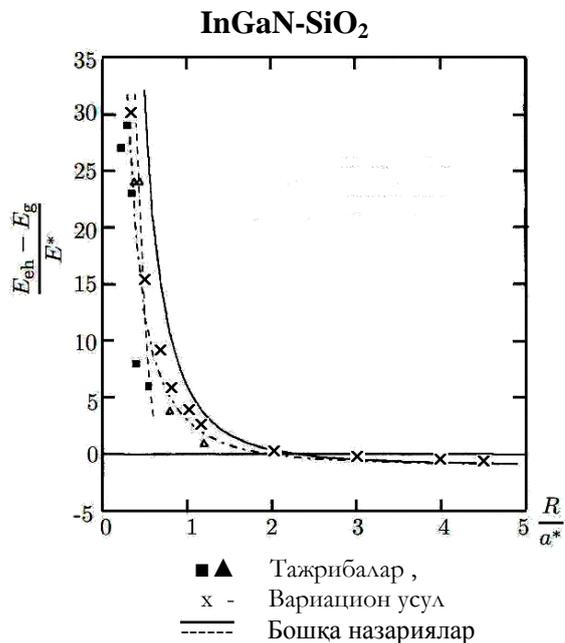
***InGaN-SiO<sub>2</sub>* асосидаги Квант нуқталар:** Тақиқланган соҳаси турлича бўлган икки хил яримўтказгичли гетероўтишда ҳосил бўладиган (3-расм) потенциал барьерлар, яримўтказгич-диэлектрик гетероўтишидаги ҳосил

бўладиган потенциал барьерларга нисбатан амалда анча кичик бўлади. Натижада, электрон ва ковак орасидаги кулон тортишув энергияси - экситон энергиясининг катта қисмини ташкил этади.

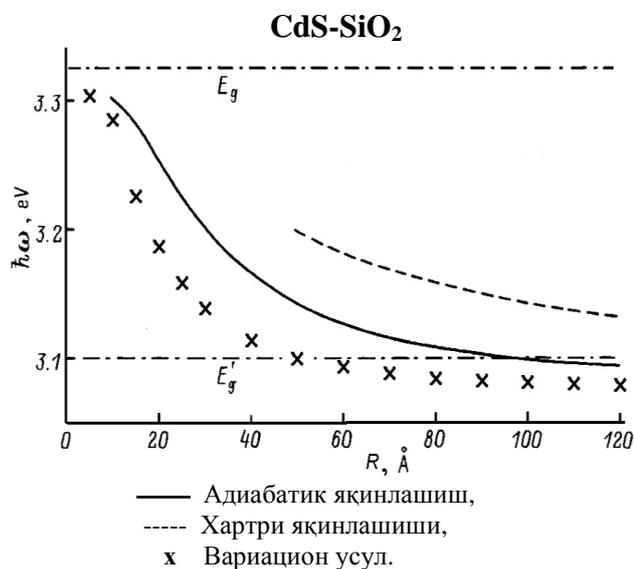
2- жадвал

(9) функционалдан ҳисобланган экситон энергияси

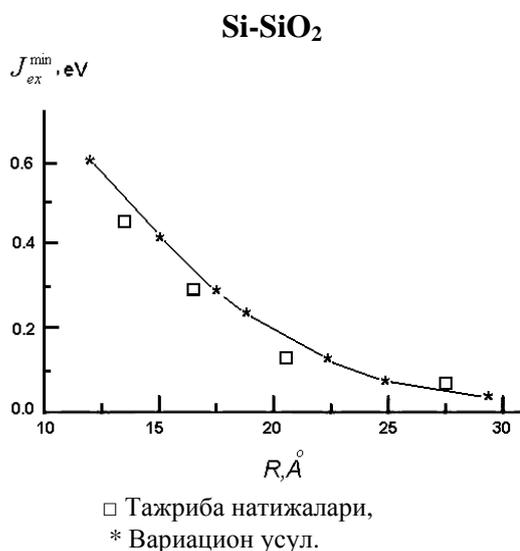
$R, \text{Å}$	$R/a^*$	$(E_{eh}-E_g)/E^*$
10	0.33	29.797
20	0.66	9.66
30	1.00	3.9312
40	1.33	1.9040
50	1.66	0.9319
60	1.99	0.3998
70	2.33	0.2842
80	2.66	-0.1157
90	2.989	-0.2480
100	3.32	-0.3391
110	3.65	-0.4035
120	3.99	-0.4502
130	4.32	-0.4848
140	4.65	-0.5108
150	4.98	-0.5309



2-расм. Турлича назарий натижалар ҳамда тажриба маълумотлари билан таққослаш



3-расм. Фотон ютилиш энергиясини сферик квант нуқта радиусига боғланиши



4-расм. Экситон энергияси  $J_{ex}^{\min}$  ни тажриба маълумотлари билан таққослаш

**Si-SiO<sub>2</sub> асосидаги Квант нуқталар:** Диссертацияда турлича аналитик ва сонли назариялар натижаларини квант нуқталарда ўтказилган тажриба билан таққосланган. Қолаверса Si материалининг параметр қийматлари берилган. Чизмадаги квадратчалар тажриба, юлдузчалар эса назарий ҳисоблашлар.

Адабиётларда  $InGaN$  асосидаги сферик квант нуқтада экситон энергиясини Хартри моделида ҳисобланган.

Квант нуқтада экситон ҳосил бўлишида ютилган фотон энергияси  $\hbar\omega = E_{g2} + J_{ex}$  формула бўйича ҳисобланган, санок боши кристалл-матрица  $In_{0.5}Ga_{0.95}N$  ни тақиқланган соҳаси  $E_{g2}$  дан олинган. Икки ўлчамли  $D^-$  марказ энергиясини Хиллерас координаталари усулида ҳисоблаб, бошқа тадқиқотлар натижалари билан таққосланган.

Вариацион усулни асосий талаби синов тўлқин функциясини имкон қадар ўрганилаётган объектнинг хусусиятларини ўзида акс эттирадиган қилиб танлашдир. Масалан,  $X^-, X^+$  трионлар энергиясини ҳисоблашда уч параметрли Чандрасекар синов тўлқин функциясидан фойдаланилган:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [\exp(-ar_1 - br_2) + \exp(-br_1 - ar_2)](1 + c|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (10)$$

$D^-$  марказ энергиясини ҳисоблаш учун қуйидаги учта вариацион параметрли синов тўлқин функциясидан ҳам фойдаланиш мумкин:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp[-a(r_1 + r_2)](1 + b|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| + c(r_1 - r_2)^2). \quad (11)$$

Маълумки,  $D^-$  марказнинг икки электрони битта орбитада нисбий ҳаракат қилади. Қуйида (11) тўлқин функция ёрдамида икки ва уч ўлчамли  $D^-$  марказ тўла энергияси ва ионизация энергияси ҳисобланган. Ушбу системанинг тўла энергия операторини энергия ва узунлик бирликларга ўтказилса қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин:

$$H = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}, \quad (12)$$

$D^-$  марказ тўла энергиясини функционалини топиш учун (11) синов функцияси ёрдамида (12) ни ўрта қийматини ҳисоблаш керак. Ўрта қийматини қисқача қуйидагича ёзиш мумкин:

$$E\{a, b, c\} = \frac{\int \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^2 r_1 d^2 r_2}{\int \psi^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^2 r_1 d^2 r_2} = \frac{K + V}{N}, \quad (13)$$

бу ерда  $K$  – кинетик энергия,  $V$  – потенциал энергиялар,  $N$  – нормаллаштириш бўлувчиси ҳисобланган. Янги Хиллерас ўзгарувчилари  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_2 - r_1 = r_1 - r_2$ ,  $u = r_{12}$  га ўтилади. Икки ўлчамдаги ўтиш матричаси (якобиан) ҳам уч ўлчамдаги каби ҳисобланади. Натижада, Хиллерас координаталарида барча ифодалар аналитик кўринишда ҳисобланган.

Натижада,  $D^-$  марказ тўла энергияси (13) функционални  $a, b, c$  вариацион параметрлар бўйича минимумини сонли усулда топилади. Ҳисоблашларда, юқоридаги тўлқин функция орқали топилган уч ўлчамли  $D^-$  марказ тўла энергияси  $E(3d) = -1.05062Ry$  га тенг чиқди. Таққослаш учун, водород атомини манфий  $H^-$  иони учун тажрибада топилган энергияни келтирилади  $1.055Ry$ . Икки ўлчамда эса  $D^-$  марказ тўла энергияси  $E(2d) = -4.46522Ry$  га тенг чиқди. Демак, фазо ўлчами пасайганда ( $3d \rightarrow 2d$ ),  $D^-$  марказ тўла энергияси деярли  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$  марта ошди.

Диссертациянинг «Квант нуқтада катта радиусли полярон характеристикасини вариацион таҳлили» деб номланган учинчи бобида аввалги бобида келтирилган экситон ёки  $D^-$  марказ масалаларида электрон ёки ковакни яримўтказгични зоналар моделида қаралди. Бошқача айтганда, система тўла энергиясида - электрон ёки ковакни ўзаро кулон таъсири ва уларни гетероструктурани квант ўраси билан таъсирлашув энергиялари қатнашди.

Назарий тадқиқотларда кучли конфайнмент шароитидаги поляронни ҳажмий кристалдаги полярондан энергия жиҳатдан сезиларли даражада фарқи кўрсатилган - булардан баъзиларини муҳокама қилинди.

Электроннинг энг қуйи ( $n=1, l=0$ ) энергия сатҳи  $E_{1s}$  ни силжишини ҳисоблаш учун қуйидаги яримклассик Ландау-Пекар функционалидан фойдаланилган:

$$E[\varphi(r)] = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int \varphi(r) \nabla^2 \varphi(r) d^3r + \int V(r) \varphi^2(r) d^3r + V_p + W_p, \quad (14)$$

$\nabla$  - Набла оператори, тўла энергияни аниқлашда кристалнинг поляризация майдони ҳосил қилган энергияси ва электроннинг майдон индукциясини ҳисобга олган ҳолда мос равишда қуйидагиларни эътиборга олиш зарур:

$$V_p = -\frac{e^2}{\epsilon^*} \int d^3r d^3r' \frac{\varphi^2(r) \varphi^2(r')}{|r-r'|}, \quad W_p = \frac{e^2}{2\epsilon^*} \int d^3r d^3r' \frac{\varphi^2(r) \varphi^2(r')}{|r-r'|}. \quad (15)$$

Агар, синов тўлқин функцияси  $\varphi(r)$  маълум бўлса, вариацион принципга кўра, (14) функционалнинг минимум шартидан тўла энергияни ва бир йўла кинетик энергияни ҳамда  $V_p, W_p$  потенциал энергияларни алоҳида ҳисоблаб олиш мумкин бўлади.

Наноструктурада конфайнмент шароитида ўзаро таъсирлашувчи электрон-фонон системасининг тўла энергия оператори қуйидагича ёзилган:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \sum_q [v_q b_q \exp(iqr) + v_q^* b_q^+ \exp(-iqr)] + \sum_q \hbar \omega_0 b_q^+ b_q, \quad (16)$$

бу ерда  $m$ -ўтказувчан соҳасида электрон массаси,  $b_q^+, b_q$  - импульси  $q$  бўлган фононнинг ҳосил қилиш ва йўқотиш операторлари,  $\omega_0$  - оптик фонон частотаси,  $v_q$  - электрон-фонон ўзаро таъсир форм-фактори.

Ҳисоблашлар натижада, Грин функцияси қуйидаги кўринишга келади:

$$G(r, r') = \frac{1}{\hbar \omega_s \pi^{3/2} a_s^3} \exp\left(-\frac{r^2 + r'^2}{2a_s^2}\right) \int_0^\infty dt \frac{\exp(-tW_p)}{[1 - \exp(-2t)]^{3/2}} \exp\left(\frac{2\mathbf{r}\mathbf{r}'e^{-t} - (r^2 + r'^2)e^{-2t}}{a_s^2(1 - e^{-2t})}\right), \quad (17)$$

полярон энергияси учун қуйидаги ифодани топиш мумкин:

$$\epsilon_p = \frac{3}{2} \mu^2 + \frac{3\gamma^2}{8\mu^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \mu \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1 - \exp(-2\mu^2 t)}}. \quad (18)$$

Бу ерда  $\alpha, \gamma, \mu, t$  – белгилашлар ва вариацион параметрлар, аниқланган қийматдан фойдаланилса, куйидаги муносабат келиб чиқади  $\mu \rightarrow \infty$ :

$$\varepsilon_p = \frac{3}{2}\mu^2 + \frac{3\gamma^2}{8\mu^2} - \alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\mu. \quad (19)$$

Параболик потенциалли квант нуқтадаги полярон энергияси учун топилган формулалар ўзаро таққосланган.

### 3- жадвал

#### Поляроннинг турли $\alpha$ (Фрёлх константаси) ва $\gamma$ (вариацион параметри) учун энергияларини таққослаш

		Полярон энергияси $E_p$		
$\alpha$	$\gamma$	(3.40)	(3.41)	(3.44)
0.1	1	1.39	1.44	1.40
	26	38.70	38.71	38.71
	46	68.61	68.62	68.61
2.0	1	-0.78	0.24	-0.50
	26	32.85	33.14	33.03
	46	61.02	61.24	61.16
5.0	1	-4.39	-2.45	-3.49
	26	23.21	23.89	23.64
	46	48.63	49.16	48.97

Диссертациянинг «Икки ўлчамли фазода катта радиусли полярон ва биполярон масаласи» деб номланган тўртинчи бобида кучсиз, кучли ва оралик электрон-фонон ўзаро таъсир қийматларида икки ўлчамли (2d) полярон ва биполярон тўла энергиясининг таҳлили келтирилган. Электрон-фонон корреляциясини ҳисобга олишда Буймистров-Пекар аппроксимацияси қўлланилиб, 2d-полярон тўла энергиясини уч ўлчамга (3d) нисбатан сезиларли даражада камайиши кўрсатилган.

Икки ўлчамли фазода ҳам полярон тўла энергия оператори ва синов тўлқин функцияси олдинги боблардагидек ёзилади:

$$H_p = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + \sum_q [V_q b_q \exp(iqr) + V_q^* b_q^+ \exp(-iqr)] + \sum_q \hbar \omega_0 b_q^+ b_q, \quad (20)$$

системанинг тўла энергияси ҳисобланганда куйидаги натижа келиб чиқади:

$$J_p[\varphi(r)] = K - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} W_q^2 - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} \frac{[1 - W_q^2]^2}{1 - W_q^2 + \ell_0^2 q^2}. \quad (21)$$

Аввалги тадқиқотларда Фейнман интеграллари усулида (F) ва модификациялаштирилган Ли-Лоу-Пайнс усулида (MLLP) ҳам 2d-полярон энергияси ҳисобланган.

Фейнман интеграллари усулида ҳисобланганда куйидаги натижа келиб чиқади:

$$E_p^F = \frac{(v-w)^2}{2v} - \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty dt \frac{\exp(-t)}{\sqrt{D(t)}}, \quad D(t) = \frac{w^2}{2v^2} t + \frac{v^2 - w^2}{2v^3} [1 - \exp(-vt)], \quad (22)$$

модификациялаштирилган Ли-Лоу-Пайнс усулида ҳисобланганда куйидаги натижа келиб чикди:

$$E_p^{\text{MLLP}} = \frac{\lambda}{2} - \alpha \int_0^{\infty} dt \frac{\exp(-(1-a)^2 t^2 / \lambda)}{1+a^2 t^2}. \quad (23)$$

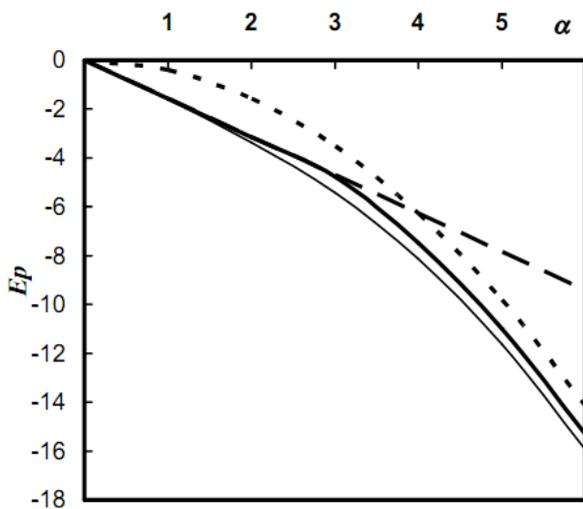
Бу ерда  $\alpha, \lambda, a, t$  – белгилашлар ва вариацион параметрлар. Такқослаш учун, 5 ва 6- расмларда полярон энергиясини электрон-фонон ўзаро таъсир константасига боғланиш графиги келтирилган.

**Икки ўлчамли катта радиусли биполярон учун тўла энергия Гамильтонида куйидаги кўринишга эга:**

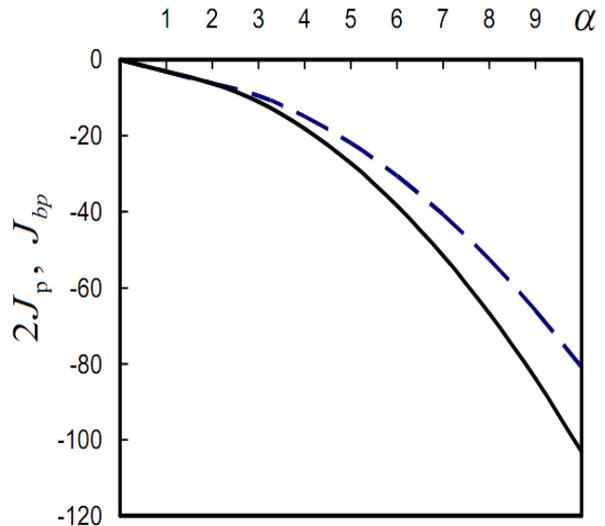
$$H_{bp} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} r_{12}} + \sum_q [V_q b_q (\exp(iqr_1) + \exp(iqr_2)) + V_q^* b_q^+ (\exp(-iqr_1) + \exp(-iqr_2))] + \sum_q \hbar \omega_0 b_q^+ b_q, \quad (24)$$

бу ерда системанинг тўла энергияси куйидагича ёзилади:

$$J_{bp} = K_1 + K_2 + V_{12} - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} W_q^2 - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} \frac{[D_q - W_q^2]^2}{D_q - W_q^2 + 2\ell_0^2 q^2}. \quad (25)$$



**5-расм.** 2d-полярон энергиясини электрон-фонон ўзаро таъсир константасига боғланиши: кучли ўзаро таъсирда  $\alpha \gg \alpha_c$  (нукталар), кучсиз ўзаро таъсирда  $\alpha \ll \alpha_c$  (штрихли чизик) ва ўзаро таъсирни оралиқ қийматларида (узлуксиз қуюқ чизик); Юпқа узлуксиз олинган чизик – Фейнманнинг траектория бўйлаб интеграллаш усули



**6-расм.** Олинган ҳисоблашда 2d-биполярон энергиясини (узлуксиз чизик) ва Буймистров-Пекар функционал ёрдамида ҳисобланган 2d-полярон энергиясини (штрихли чизик) электрон-фонон ўзаро таъсир доимийси  $\alpha$  га боғланиш графиги:  $\beta = 1$ ,  $\epsilon_{\infty} / \epsilon_0 = 0$ , энергиялар  $\hbar \omega_0$  бирлигида.

Икки электрон Кулон итаришув параметрини  $\beta = 1/(1 - \epsilon_{\infty} / \epsilon_0)$  ифода билан аниқлаш мумкин. Хусусий ҳолда,  $\beta = 1$ ,  $\epsilon_{\infty} / \epsilon_0 = 0$  лимитда, биполярон тўла

энергияси  $J_{bp}$  ни полярон энергиясини икки баробари  $2J_p$  га нисбати муҳим катталиқ бўлиб, унинг қиймати  $\alpha \rightarrow \infty$ , ( $g_q = 0$ ) ҳолда (24.1) функция ёрдамида ҳисобланганда  $J_{bp}/2J_p \approx 1.25$  га тенглиги топилган. Бу ерда адиабатик полярон учун  $J_p = -\pi\alpha^2/8$  га тенглигини назарда тутиш керак.

## ХУЛОСА

Кичик ўлчамли яримўтказгичли гетероструктуралардаги катта радиусли экситон,  $D^-$  марказ, квант нуқтадаги катта радиусли полярон, икки ўлчамли фазодаги полярон ва биполярон масалаларини ўрганиш асосида қуйидаги хулосалар қилинди:

1. Чекли баландликка эга бўлган гетеробарьерли сферик квант нуқтадаги экситон учун тўла ва корреляция энергияларини таҳлил қилинди. Ҳисоблашларда икки хил - Хартри кўринишдаги корреляциясиз ҳамда корреляцион тузатмали тўлқин функциялар синаб кўрилиб, экситоннинг корреляцияли энергияси нисбатан кучлироқ боғланишга эга эканлиги аниқланди.

2. Икки ўлчамли фазода  $D^-$  марказ тўла энергияси ва электроннинг боғланиш энергияларини Хиллерас координаталари ёрдамида сонли усулда аниқланди. Уч ўлчамли  $D^-$  марказ энергияси, икки ўлчамда эса  $D^-$  марказ тўла энергиялари топилди. Фазо ўлчами пасайганда ( $3d \rightarrow 2d$ ),  $D^-$  марказ тўла энергияси деярли  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$  марта ошиши аниқланди.

3. Чекли потенциал ўрали сферик квант нуқтада электрон энергиясини поляронли силжишини адиабатик моделда таҳлил қилиниб, уни квант нуқта радиусига боғланиши ҳисобланди. Чекли потенциал барьерда топилган поляронли силжиш барьер кенглиги  $a \approx 3nm$  га етганда полярон энергияси экстремал қийматга эришиши аниқланди.

4. Буймистров-Пекар аппроксимациясида, ноадиабатик эффектларни ҳисобга олган ҳолда, квант нуқтадаги полярон энергиясини баҳолаш усуллари ишлаб чиқилди.

5. Параболик потенциалли квант нуқтада полярон масаласида фононлар тўлқин функцияси Грин функцияси усулида аниқ ечими топилди. Бунинг учун Грин функциясини спектрал ёйилмаси ҳисобланиб, кучли конфайнмент шароитида ўрадаги электрон тезроқ ҳаракат қилиб, адиабатик натижа ҳам аниқ ечимга деярли мос келиши кўрсатиб берилди.

6. Буймистров-Пекарнинг ноадиабатик методида: кучсиз, кучли ва оралик электрон-фонон ўзаро таъсир қийматларида  $2d$ -полярон ва биполярон тўла энергиясини таҳлил қилинди, ҳамда энергия функционали топилди.

7. Полярон энергияси учун топилган критик қиймати электрон-фонон доимийси  $\alpha_c = 2.94$  бўлганда, уч ўлчамли полярон моделидаги критик қиймат  $\alpha_c(3d) \approx 6$  дан анча кичиклиги топилди. Бу натижалар ёрдамида, фазо ўлчами камайганда  $3d \rightarrow 2d$  полярон энергияси ортишини кўрсатиб берилди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.30.05.2018.FM/T.34.01  
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ  
ПРИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ**

---

**НАМАНГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**ИНОЯТОВ ШУКУРИЛЛО ТУРГУНБАЕВИЧ**

**ПОЛЯРОНЫ И ЭКСИТОНЫ БОЛЬШОГО РАДИУСА В  
НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ  
ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ**

**01.04.10 – Физика полупроводников**

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)  
ПО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

**Ташкент – 2019**

**Тема диссертации зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером В2019.1.PhD/FM318.**

Диссертация выполнена в Наманганском государственном университете.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, и резюме на английском языке) размещен на веб-странице Научного совета ([www.fti.uz](http://www.fti.uz)) и Информационно-образовательном портале «Ziyonet» ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)).

**Научный руководитель:** **Гулямов Абдурасул Гафурович**  
доктор физико-математических наук

**Официальные оппоненты:** **Разыков Тахирджон Муталович**  
доктор физико-математических наук, профессор

**Расулов Рустам Явкачович**  
доктор физико-математических наук, профессор

**Ведущая организация:** **Ташкентский университет информационных технологий**

Защита диссертации состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 года в \_\_\_ часов на заседании Научного совета DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 при Физико-техническом институте. Адрес: 100084, г.Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, дом 2Б. Административное здание Физико-технического института, зал конференций. Тел./Факс: (+99871) 235-42-91, e-mail: [ftikans@uzsci.net](mailto:ftikans@uzsci.net).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Физико-технического института (зарегистрирована за № \_\_\_). (Адрес: 100084, г.Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, дом 2Б. Тел/факс: (99871) 235-30-41.

Автореферат диссертации разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019г.

(реестр протокола рассылки № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 2019г.).

**Н.Р. Авезова**  
председатель Научного совета по  
присуждению ученых степеней, д. т. н.  
ведущий научный сотрудник

**А.Г. Комилов**  
ученый секретарь Научного совета по  
присуждению ученых степеней, к.т.н.

**А.В. Каримов**  
председатель Научного семинара при  
Научном совете по присуждению ученых  
степеней, д.ф.-м. н., профессор

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** В настоящее время изучение физики наноразмерных объектов на основе полупроводниковых материалов и улучшение характеристик электронных устройств нового поколения, изготовленных на этой основе, является одним из приоритетных направлений физики твердого тела и, в частности, физики полупроводников. Интерес к этой области исследований растет во всем мире и объем проводимых работ подобного рода существенно увеличивается с каждым годом. Во многом это связано с успехом технологии молекулярно-лучевой эпитаксии в лабораторных условиях, благодаря которой появилась возможность создавать полупроводниковые слои с уникальными свойствами. В настоящий момент исследования энергетических характеристик гетероструктур, толщина которых порядка десятков нанометров, создание и обобщение теоретических моделей, описывающих энергетические состояния электронов, является актуальной задачей исследований в области физики.

На сегодняшний день такие наноразмерные гетероструктуры применяются для создания высокочастотных транзисторов, работающих в терагерцовых диапазонах, квантово-каскадных лазеров, резонансно-туннельных диодов и детекторов, оптических модуляторов, фотоприёмников и других электронных приборов. Именно поэтому исследование изменений энергетических спектров носителей зарядов при переходе от объемных к низкоразмерным гетероструктурам и выявление новых квантовых эффектов в них является важной проблемой для физики низкоразмерных полупроводниковых приборов.

В нашей Республике уделяется особое внимание развитию науки, в том числе развитию полупроводникового приборостроения и электроники. В этой связи, учеными нашей страны получен ряд новых полупроводниковых материалов и получены существенно важные результаты по исследованию внешних воздействий на характеристики низкоразмерных гетероструктур. В стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017-2021 годы, указаны задачи стимулирования научно-исследовательской и инновационной деятельности, широкое внедрение в производство энергосберегающих технологий, расширение использования возобновляемых источников энергии. В этом аспекте одной из важных задач является разработка новых электронных материалов и структур на их основе, стойких к различным внешним воздействиям и эффективных методов контроля их параметров.

Данное диссертационное исследование в определённой степени соответствует задачам, обозначенным в постановлениях Президента Республики Узбекистан ПП–4348: «О дополнительных мерах по созданию благоприятных условий для дальнейшего развития электротехнической промышленности и повышению инвестиционного и экспортного потенциала отрасли» от 30 мая, 2019 года, ПП-3855: «О дополнительных мерах по повышению эффективности коммерциализации результатов научной и научно-технической деятельности» от 14 июля, 2018 года и ПП-2789 «О мерах по

дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организаций, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля, 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

**Соответствие исследования с приоритетами развития науки и техники.** Диссертационная работа выполнена в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики Узбекистан: II. «Энергетика, энерго и ресурсосбережение, транспорт, машино и приборостроение».

**Степень изученности проблемы.** Анализ задач, связанных с такими объектами как электрон, дырка, экситон,  $D^-$  центр, полярон или биполярон, находящихся в низкоразмерной гетероструктуре, сводится к решению систем нелинейных уравнений и имеет ряд математических сложностей. Давыдов А.С. приводит точные решения для энергий электронов и дырок в объемном экситоне, Billaud V., Picco M. и Truong T. получили результаты нахождения этих же параметров в квантовых точках с размерами радиуса 1нм - 15нм. Бугров В.Е., Константинов О.В., не учитывая энергию корреляции электронов и дырок в квантовой точке (КТ), на основе InGaN показали, что основную часть энергии системы составляет кулоновская энергия. Watanabe K., Fujii M. и Hayashi S. провели сравнение с экспериментом энергии экситона в КТ на основе Si-SiO<sub>2</sub> со следующими данными  $m_1=0.5m_0$ ,  $m_2=0.5m_0$ ,  $E=8$ ,  $V_1=3.2$ ,  $V_2=4.3$ .

С этой точки зрения, для решения задач подобного рода, разработка приближенных методов и создание удобных алгоритмов расчета являются существенно важными. Для решения таких задач в основном используется метод Хартри-Фока (Екимов А.И., Онушенко А.А.) и вариационные методы (Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А. и W. Xie). Как известно, в методе Хартри-Фока не учитывается энергия корреляции. В вариационном методе в первую очередь проводится расчет кратным интегрированием с учетом пространства. Именно поэтому, во многих случаях, при расчете, пробную волновую функцию необходимо выбирать в более простом виде.

В настоящее время, Узбекскими учеными проф. Г.Гулямовым и академиком М.Бахадырхановым с сотрудниками, наблюдалось достаточно большое отрицательное магнитосопротивление в компенсированном кремнии. Вместе с этим, Р.Расуловым и его учениками, исследованы механизмы образования КТ.

Однако, в приведенных выше работах, при исследовании полной и корреляционной энергии экситонов в гетеробарьерной сферической КТ с конечной высотой, не проводился анализ поляронного сдвига энергии связи электрона и полной энергии  $D^-$  центров в двумерном пространстве, при использовании адиабатической модели с помощью координат Хиллераса, а также, при расчете их зависимости от радиуса КТ, не использовались приближенные вариационные методы.

**Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация.** Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научного проекта по фундаментальным исследованиям Наманганского государственного университета по теме: Ф2-ОТ-О-15494 «Улучшение эффективности излучателей, фотоэлементов и других видов оптоэлектронных приборов на основе исследования квантово точечных гетеро и наноструктурных экситонов, биполярнов и явлений переноса» (2012-2016).

**Целью исследования** является установление энергетических характеристик экситонов и поляронов большого радиуса в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах от размеров квантовых точек.

**Задачи исследования:**

расчет энергии экситона в гетеробарьерной сферической квантовой точке с конечной высотой гетеробарьера, определение зависимости энергии экситона от радиуса квантовой точки, сравнение полученных результатов с экспериментальными результатами в квантовых точках на основе  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ ,  $Si-SiO_2$  и с другими теоретическими результатами;

определение полной энергии двумерного  $D^-$  центра и энергии связи электрона, а также проведение оценки изменений энергии при уменьшении размеров пространства;

оценка поляронного сдвига нижнего уровня электрона в сферической квантовой точке с конечной высотой гетеробарьера в адиабатическом и неадиабатическом приближении, решение с помощью функции Грина дифференциального уравнения, описывающего сдвиг координат фононов в параболической модели конфаймента;

анализ с помощью вариационных методов энергии двумерного полярона и биполярона, определение условия возникновения устойчивого биполярона, сравнение результатов с результатами Фейнмана и Ли-Лоу-Пайнса.

**Объектом исследования** являются  $D^-$  центры в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах, экситоны в квантовых точках на основе  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ ,  $Si-SiO_2$ , поляроны и биполярны в двумерном пространстве.

**Предметом исследования** являются процессы, связанные с зависимостью энергии квазичастиц, находящихся в низкоразмерных гетероструктурах и в квантовых точках от радиуса квантовой точки и размеров квантовой ямы.

**Методы исследований.** Приближенные методы теоретической физики: вариационный расчёт, численные методы, математическое моделирование, спектральная функция Грина.

**Научная новизна исследования** заключается в следующем:

впервые для экситонов в локализованной сферической квантовой точке определён функционал энергии для 1-го уровня, с учётом динамической корреляции в пробной волновой функции, объясняющая экспериментальные результаты в квантовой точке  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ ,  $Si-SiO_2$ ;

численно определена полная энергия двумерного  $D^-$  центра и энергия связи электрона в координатах Хиллераса, а также определено, что полная

энергия  $D^-$  центра равняется  $E(2d) = -4.46522Ry$  и, с уменьшением размеров пространства ( $3d \rightarrow 2d$ ), энергия  $D^-$  центра увеличивается почти в  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$  раза;

показано, что в зависимости энергии поляронного сдвига, определённой в сферической квантовой точке с конечной высотой потенциального барьера, имеется точка экстремума, в частности показано, что когда радиус квантовой точки, уменьшаясь, достигает величины  $a \approx 3nm$ , энергия поляронного сдвига приобретает максимальное значение, а затем начинает уменьшаться;

разработана простая модель расчета энергии полярона, использующая функцию Грина в спектральном разложении, с учетом неадиабатических эффектов;

впервые показано, что вычисленное неадиабатическим методом Буймистрова-Пекара значение полной энергии слабого и сильного электроно-фононного взаимодействия двумерного полярона имеет 98,5% совпадение с результатами, полученными методом Фейнмана.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

показано, что функционал, определенный для экситона в сферической квантовой точке для наноструктур, типа  $CdS - SiO_2$ ,  $InGaN - SiO_2$ ,  $Si - SiO_2$ , позволяет приблизительно оценить электронно-дырочную энергию кулоновского взаимодействия и поправку динамической корреляции;

функционал энергии полярона в квантовой точке, определённый методом функций Грина, является более точным, чем другие приближенные методы, и может применяться при анализе электронно-фононного взаимодействия в полярных полупроводниковых наночастицах.

**Достоверность результатов исследований** обосновывается тем, что оптическая щель, определенная для экситона, совпадает с экспериментальными данными для квантовых точек на основе  $CdS - SiO_2$ ,  $InGaN - SiO_2$ ,  $Si - SiO_2$  и с другими теоретическими данными, точность характеристик для двумерного полярона и биполярона не уступает результатам, полученным методами Фейнмана и Ли-Лоу-Пайнса, а также использованием приближенных методов при вариационных расчётах.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.**

Научная значимость результатов исследования определяется получением количественных данных о физических свойствах квазиобъектов в полупроводниковых наноструктурах и созданием новых представлений об этих объектах.

Практическая значимость результатов исследований определяется возможностью получения наноразмерных полупроводниковых структур с заданными параметрами, определяемыми при использовании теоретических расчётов физических свойств и энергетических спектров таких объектов, как экситон,  $D^-$  центр, полярон, биполярон и т. д.

**Внедрение результатов исследования.** На основе изучения механизмов зависимости энергии экситонов в сферической квантовой точке от радиуса сферической квантовой точки получено:

Результаты, по вариационному расчету 1s-уровня экситона, локализованного в сферической квантовой точке с гетеробарьером конечной высотой, использованы в гранте №13-02-00073: «Квантовые точки первого рода с непрямой в пространстве квазиимпульсов структурой зоны проводимости» института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (справка института 15507-46-2433: физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН от 9 июня, 2019 года). Эти результаты дали возможность решить задачу зависимости энергии экситона от радиуса квантовой точки;

результаты, полученные при анализе вариационного расчета кулоновской и корреляционной энергии экситона в сферической квантовой точке с конечным гетеробарьером, были использованы при объяснении процессов возникновения циклотронного резонанса в квантовой яме в гранте Ф-2-21: «Математическое моделирование плотности поверхностных состояний на границе полупроводник-диэлектрик» (2011-2016) (справка Министерства высшего и среднего специального образования №89-03-2489 от 15 июня, 2019 года). Использование научных результатов позволило определить транспортную массу и полную концентрацию электронов в квантовой яме, на основе  $CdS-SiO_2$ ,  $InGaN-SiO_2$ ,  $Si-SiO_2$ .

**Апробация результатов исследования.** Основные результаты диссертационной работы доложены и обсуждены на 3 х международных и 4 х республиканских научно-практических конференциях.

**Публикации результатов исследования.** По теме диссертации опубликовано 15 научных трудов, из них 7 статей в журналах, в том числе 3 зарубежных и 4 республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертационных работ.

**Структура и объём диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, приложения, списка использованной литературы. Диссертация включает в себя 22 рисунка, 4 таблицы и 105 страниц.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

**Во введении** обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, сформулированы цель и задачи, а также объект, предмет и методы исследования, определена связь темы диссертации с научно-исследовательскими работами научно-исследовательской организации, где выполнена диссертация, изложена научная новизна исследования, обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта их теоретическая и практическая значимость, приведены краткие сведения о внедрении результатов и апробации работы, а также о структуре диссертации.

В первой главе диссертации, под названием «**Пространственное квантование в полупроводниковых структурах и его влияние на свойства квазичастиц**», обзорно описываются работы, посвященные задачам экситонов, трионов, поляронов, а также  $D^0$  и  $D^-$  центров в объемных полупроводниках. Проводится обзор литературных данных, посвященных исследованиям свойств

экситонов большого радиуса в наноструктурах. Проведен обзор работ, где исследуются  $D^0$  и  $D^-$  центры, а также поляроны в низкоразмерных структурах. Рассмотрены задачи адиабатических и не адиабатических моделей поляронов. Исходя из проведенного обзора, выявлены недостаточно исследованные проблемы в данной области и формулируется постановка задачи диссертационной работы.

Во второй главе диссертации, под названием «**Вариационный анализ характеристик экситонов большого радиуса и  $D^-$  центров в полупроводниковых гетероструктурах**», выбран вид волновой функции соответствующей задачи экситона в сферической квантовой точке и рассчитана ее энергия. Оценено кулоновское взаимодействие электронов с дырками и проведено сравнение с результатами других исследований. При расчете экситона в сферической квантовой точке, принималось, что экситон расположен в полупроводниковой частице с размером примерно  $50 \div 100$  ангстрем и с запрещенной зоной  $E_{g1}$ . Эта полупроводниковая частица находится в более массивном полупроводнике или диэлектрике с шириной  $E_{g2}$  ( $E_{g2} > E_{g1}$ ).

Гамильтониан для экситона, в данном случае, выглядит следующим образом:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + V(r_1) + V(r_2), \quad (1)$$

где  $\Delta_1, \Delta_2$  - оператор Лапласа для электрона и дырка, в которой пробная волновая функция основного состояния экситона в потенциальной яме с конечной глубиной, выбрана следующим образом:

$$\psi = \varphi(r_1)\varphi(r_2), \quad \varphi(r_{12}) = 1, \quad (2)$$

$$\varphi(r_i) = \exp(-\delta_i^2 r_i^2), \quad i=1 \div 2, \quad (3)$$

то есть, здесь пренебрегается корреляционной поправкой. Где  $\delta$  - вариационный параметр  $r_i$  - радиус вектор электрона (дырки).

Известно, что движение микрочастицы в сферической квантовой яме с конечной глубиной, определяется следующим Гамильтонианом:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 + V(r_1), \quad (4)$$

$\Delta_1$  - оператора Лапласа, и точные значения дискретных уровней  $E_{exact}$  определяется следующим трансцендентным уравнением:

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha \cdot a) = -\beta, \quad (5)$$

где,  $\hbar^2\alpha^2/2m = V_0 + E$  и  $\hbar^2\beta^2/2m = -E < 0$ .

С другой стороны, при использовании оператора энергии (4), среднее значение по базису  $\varphi(r_i) = \exp(-\delta_i^2 r_i^2)$  можно рассчитать вариационным методом  $E_{var}$ .

Для сравнения, в таблице 1 приведены значения точных  $E_{exact}$  и вариационных  $E_{var}$  значений энергии основных состояний.

**Таблица 1**

**Сравнение значений точной  $E_{exact}$  и вариационной  $E_{var}$  энергии в сферической квантовой яме**

$a, \text{ \AA}$	$E_{exact}, eV$				$E_{var}, eV$			
	$V_0=0.2eV$		$V_0=2eV$		$V_0=0.2eV$		$V_0=2eV$	
	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$	$m/m_0=0.2$	$m/m_0=5$
10	0.0000	-0.1481	-0.9602	-1.9333	0.0000	-1.1457	-0.9421	-1.9169
50	-0.1481	-0.1972	-1.9333	-1.9970	-1.1457	-1.1962	-1.9169	-1.9951
90	-0.1811	-0.1991	-1.9783	-1.9990	-1.1787	-1.1987	-1.9699	-1.9983

Как видно из данной таблицы, значения  $E_{exact}$  и  $E_{var}$  близки друг к другу. Это позволяет с помощью базиса  $\varphi(r_i) = \exp(-\delta_i^2 r_i^2)$  примерно вычислить энергию экситона. С помощью формул (1) и (3), вычисляя среднее значение оператора энергии экситона, можно определить следующий функционал:

$$E_{ex}\{\mu_1, \mu_2\} = \langle K_1 \rangle + \langle K_2 \rangle + \langle V_1 \rangle + \langle V_2 \rangle - \langle C \rangle, \quad (6)$$

где  $K_i$ ,  $C$ ,  $V_i$  аналитически вычислены в диссертационной работе.

При численных расчетах для электронов, глубина квантовой ямы выбиралась  $V_1 = 0.0675 eV$ , а эффективная масса  $m_1 = 0.2m_0$ , для дырок эти значения принимались  $V_2 = 0.1575 eV$  и  $m_2 = m_0$ , диэлектрическая проницаемость среды принималось равная  $\varepsilon = 9$ . Эти значения характерны для квантовых точек из материала *InGaN*.

В дальнейших исследованиях теоретически вычисленные результаты по энергетическим характеристикам экситона, которые сравнивались с экспериментальными результатами для квантовых точек на основе *CdS* и *Si* показано их примерное совпадение. Для экситона пробная волновая функция выбрана в следующем виде (с учетом корреляции):

$$\psi = \varphi(r_1)\varphi(r_2)\phi(r_{12}) = (\exp(-a r_1^2))(\exp(-b r_2^2))(\exp(-c(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2)). \quad (7)$$

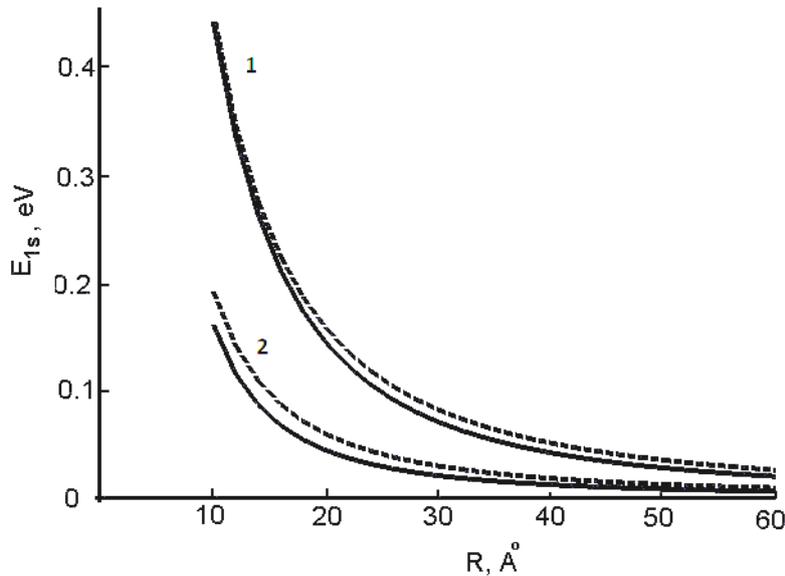
Известно, что в объемных кристаллах (в отсутствие конфаймента) относительное движение электронов и дырок имеет точное решение в экспоненциальном виде. Последний множитель  $\phi(r_{12})$  в выбранной пробной функции (7) очень удобен для расчета функционального интеграла и решение дает значение, близкое к точному значению экситона, погрешность составляет примерно  $\sim 10\%$ .

Для определения функционала полной энергии экситона, необходимо с помощью волновой функции (7) вычислить среднее значение гамильтониана:

$$J_{ex}\{a, \beta, \gamma\} = \frac{\langle \psi H \psi \rangle}{\langle \psi \psi \rangle}, \quad (8)$$

где,  $a, \beta, \gamma$  - вариационные параметры, вычисляя интеграл в (8), функционал полной энергии экситона можно записать в следующем виде:

$$J_{ex}\{\alpha, \beta, \gamma\} = \frac{\hbar^2}{2R^2} \left\{ \frac{1}{m_1} K_1(\alpha, \gamma) + \frac{1}{m_2} K_2(\beta, \gamma) \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R} C(\alpha, \beta, \gamma) + \bar{V}_1(\alpha, \beta, \gamma) + \bar{V}_2(\alpha, \beta, \gamma). \quad (9)$$



1.  $V=1\text{eV}$ ,  $m^*=0.5m_0$  2.  $V=3\text{eV}$ ,  $m^*=2m_0$

**Рис.1. Энергия состояний  $1s$  в ограниченной сферической яме: сплошная линия – точное решение, штриховая линия – вариационное решение по орбитали Гаусса**

**Квантовые точки на основе  $CdS-SiO_2$ :** В диссертационной работе проведены сопоставления аналитических и численных теоретических результатов с экспериментальными результатами, полученных по квантовым точкам на основе сернистого кадмия  $CdS$ . На основе данных таблицы 2 получен график, приведенный на рисунке 2., где проводится сравнение наших теоретических расчётов с экспериментальными данными. Теоретические данные на этом графике обозначены крестиками, а экспериментальные данные обозначены треугольниками и квадратами.

**Квантовые точки на основе  $InGaN-SiO_2$ :** Потенциальные барьеры, возникающие в гетеропереходах, создающихся полупроводниками с различными ширинами (Рис.3.) запрещенной зоны, бывают гораздо меньше потенциальных барьеров, возникающих в гетеропереходах полупроводник-диэлектрик. В результате этого, энергия Кулоновского взаимодействия электронов и дырок составляет большую часть энергии экситона.

Таблица 2

Энергия экситона, рассчитанная при помощи функционала (9)

$R, \text{Å}$	$R/a^*$	$(E_{eh}-E_g)/E^*$
10	0.33	29.797
20	0.66	9.66
30	1.00	3.9312
40	1.33	1.9040
50	1.66	0.9319
60	1.99	0.3998
70	2.33	0.2842
80	2.66	-0.1157
90	2.989	-0.2480
100	3.32	-0.3391
110	3.65	-0.4035
120	3.99	-0.4502
130	4.32	-0.4848
140	4.65	-0.5108
150	4.98	-0.5309

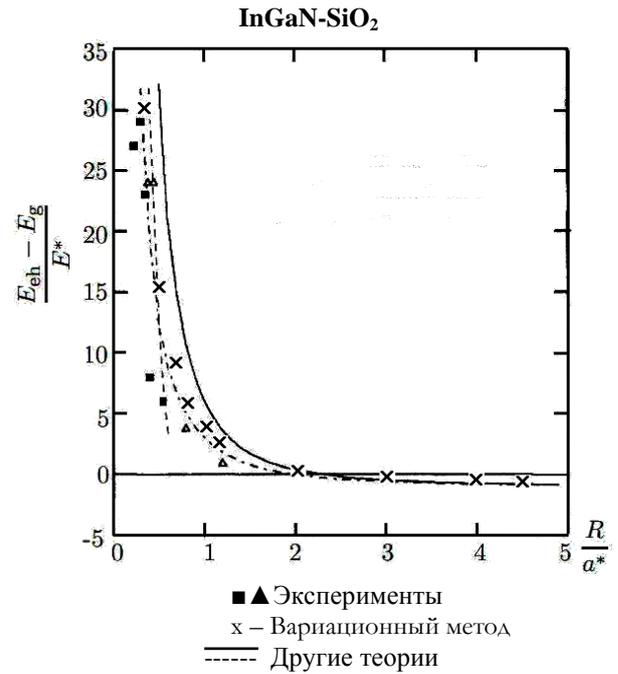


Рис. 2. Сравнение с экспериментальными данными и другими теоретическими результатами

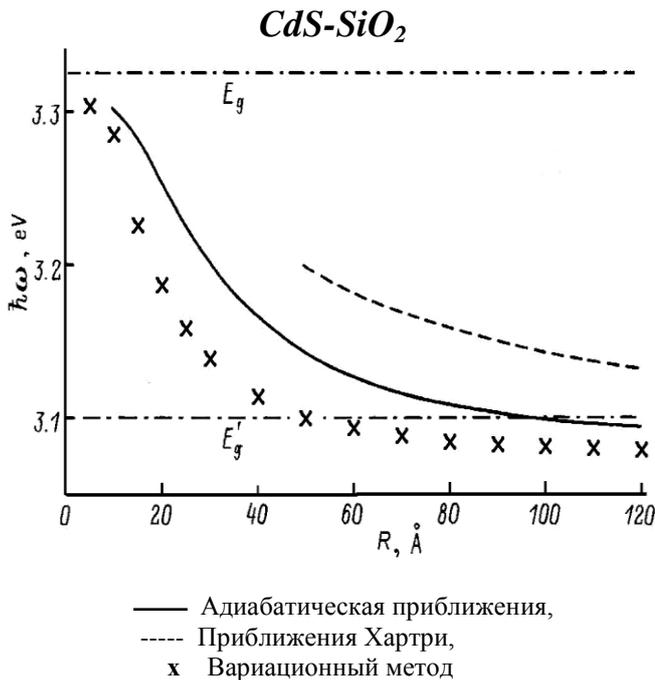


Рис.3. Зависимость поглощения фотона от радиуса квантовой точки

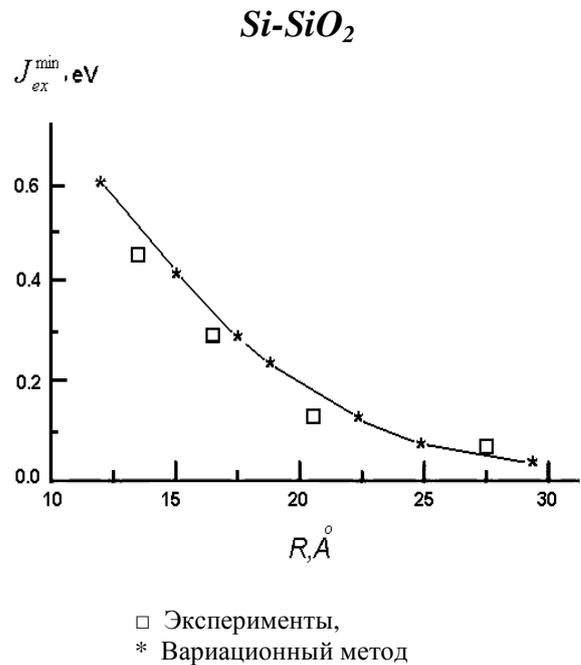


Рис.4. Сравнение энергии экситона  $J_{ex}^{\min}$  с экспериментальными данными

**Квантовые точки на основе  $Si-SiO_2$ :** В диссертационной работе проведены сопоставления аналитических и численных теоретических результатов с экспериментальными результатами, полученных по квантовым точкам на основе  $Si$ . На основе данных на рисунке 4., где проводится сравнение наших теоретических расчётов с экспериментальными данными наших

теоретических расчётов. Теоретические данные на этом графике обозначены звездочками, а экспериментальные данные обозначены квадратиками.

В литературе проведен расчет энергии экситона в сферической квантовой точке на основе  $InGaN$ , с помощью модели Хартри.

Энергия фотона, поглощенная при образовании экситона в квантовой точке, определена по формуле  $\hbar\omega = E_{g2} + J_{ex}$ . За начало отсчета принимается ширина запрещенной зоны  $E_{g2}$  кристалла-матрицы  $In_{0.5}Ga_{0.95}N$ . Рассчитана энергия двумерного  $D^-$  центра, методом координат Хиллераса и проведено сравнение с результатами других исследований.

Основным требованием вариационного метода является выбор волновой функции, по возможности содержащей все свойства исследуемого объекта. Например, при расчете энергий трионов  $X^-, X^+$  использовалась пробная волновая функция Чандрасекара:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [\exp(-ar_1 - br_2) + \exp(-br_1 - ar_2)](1 + c|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (10)$$

Для расчета энергии  $D^-$  центров можно также пользоваться волновыми функциями со следующими тремя вариационными параметрами:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp[-a(r_1 + r_2)](1 + b|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| + c(r_1 - r_2)^2). \quad (11)$$

Согласно такой волновой функции, оба электрона  $D^-$  центра движутся друг относительно друга по одной орбите. Ниже, с помощью волновой функции (11) проводится расчет полной энергии и энергии ионизации двух и трехмерного  $D^-$  центра. Полный оператор энергии данной системы можно написать в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}, \quad (12)$$

для определения функционала полной энергии  $D^-$  центров с помощью пробной функции (11) нужно рассчитать среднее значение (12). Среднее значение можно кратко записать в следующем виде:

$$E\{a, b, c\} = \frac{\int \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^2 r_1 d^2 r_2}{\int \psi^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^2 r_1 d^2 r_2} = \frac{K + V}{N}, \quad (13)$$

где,  $K$  – кинетическая энергия,  $V$  – потенциальная энергия,  $N$  – нормировочный делитель. Переменные Хиллераса переходят в  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_2 - r_1 = r_1 - r_2$ ,  $u = r_{12}$ . В итоге, все выражения вычислены аналитически в координатах Хиллераса.

Таким образом, минимумы вариационных параметров  $a, b, c$  функционала полной энергии  $D^-$  центров определяются численным методом. По результатам расчета, полная энергия  $D^-$  центров получилась равной  $E(3d) = -1.05062Ry$ . Для сравнения, приводим значение энергии отрицательного иона атома водорода  $H^-$ , определенной экспериментально  $1.055Ry$ . В двумерном пространстве полная энергия  $D^-$  центра равна  $E(3d) = -1.05062Ry$ . Следовательно, при уменьшении размеров пространства ( $3d \rightarrow 2d$ ), полная энергия  $D^-$  центра увеличивается почти в  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$  раза.

В третьей главе под названием «**Вариационный анализ характеристики полярона большого радиуса в квантовой точке**», рассматриваются электроны и дырки в терминах приведенной массы, подобно рассмотрению экситонов и  $D^-$  центров, с помощью зонной модели полупроводника. Иначе говоря, в полной энергии системы учитывается кулоновское взаимодействие электронов и дырок, а также их взаимодействие с квантовой ямой гетероструктуры.

Теоретически показано, что энергия полярона в объемном кристалле значительно отличается от случая сильного конфайнмента и обсуждаются некоторые из этих результатов.

Для расчета сдвига самого нижнего ( $n=1, l=0$ ) энергетического уровня  $E_{1s}$ , использовался следующий полуклассический функционал Ландау-Пекара:

$$E[\varphi(r)] = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int \varphi(r) \nabla^2 \varphi(r) d^3r + \int V(r) \varphi^2(r) d^3r + V_p + W_p, \quad (14)$$

$\nabla$  - оператор Набла, с учетом поляризации и индукции, выражения, определяющие энергию потенциала, созданного поляризационным полем электрона и энергию поляризации кристалла, можно записать соответственно следующим образом:

$$V_p = -\frac{e^2}{\varepsilon^*} \int d^3r d^3r' \frac{\varphi^2(r) \varphi^2(r')}{|r-r'|}, \quad W_p = \frac{e^2}{2\varepsilon^*} \int d^3r d^3r' \frac{\varphi^2(r) \varphi^2(r')}{|r-r'|}. \quad (15)$$

Если нам известна пробная волновая функция  $\varphi(r)$ , то по принципу вариации, с учетом условий минимума функционала (14), можно вычислить полную энергию и, одновременно, кинетическую и потенциальную энергию.

В условиях конфайнмента оператор полной энергии взаимодействия электрон-фононной системы записывается следующим образом:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \sum_{\mathbf{q}} [v_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}r) + v_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}^+ \exp(-i\mathbf{q}r)] + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_0 b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}, \quad (16)$$

где  $m$ - масса электрона в зоне проводимости,  $b_{\mathbf{q}}^+, b_{\mathbf{q}}$  - операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом  $\mathbf{q}$ ,  $\omega_0$ - частота оптического фонона,  $v_{\mathbf{q}}$  - форм-фактор электрон-фононного взаимодействия.

В результате расчетов, функция Грина приобретает следующий вид:

$$G(r, r') = \frac{1}{\hbar \omega_s \pi^{3/2} a_s^3} \exp\left(-\frac{r^2 + r'^2}{2a_s^2}\right) \int_0^{\infty} dt \frac{\exp(-tW_p)}{[1 - \exp(-2t)]^{3/2}} \exp\left(\frac{2\mathbf{r}\mathbf{r}'e^{-t} - (r^2 + r'^2)e^{-2t}}{a_s^2(1 - e^{-2t})}\right), \quad (17)$$

тогда для энергии полярона можно получить следующее выражение:

$$\varepsilon_p = \frac{3}{2} \mu^2 + \frac{3\gamma^2}{8\mu^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \mu \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1 - \exp(-2\mu^2 t)}} \quad (18)$$

Где,  $\alpha, \gamma, \mu, t$ -обозначение и вариационные параметры, пользуясь полученными результатами, получим следующее соотношение  $\mu \rightarrow \infty$ :

$$\varepsilon_p = \frac{3}{2} \mu^2 + \frac{3\gamma^2}{8\mu^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \mu. \quad (19)$$

На таблице 3 показано проведенное сравнение полученных выражений для энергии полярона в квантовой точке с параболическим потенциалом.

Четвертая глава диссертации, под названием «**Задача полярона и биполярона большого радиуса в двумерном пространстве**», посвящена анализу полной энергии двумерных (2d) поляронов и биполяронов при значениях сильного и слабого электрон-фононного взаимодействия. Пользуясь аппроксимацией Буймистрова-Пекара, при учёте электрон-фононной корреляции, показано, что полная энергия 2d-полярона в двумерном пространстве значительно уменьшается, по сравнению с трехмерным.

**Таблица 3**

**Сравнение энергий полярона для различных  $\alpha$  (константа Фрёлыха) и  $\gamma$  (вариационного параметра)**

		Энергия Полярона $E_p$		
$\alpha$	$\gamma$	(3.40)	(3.41)	(3.44)
0.1	1	1.39	1.44	1.40
	26	38.70	38.71	38.71
	46	68.61	68.62	68.61
2.0	1	-0.78	0.24	-0.50
	26	32.85	33.14	33.03
	46	61.02	61.24	61.16
5.0	1	-4.39	-2.45	-3.49
	26	23.21	23.89	23.64
	46	48.63	49.16	48.97

В двумерном пространстве оператор полной энергии полярона и пробная волновая функция записывается также, как и в предыдущих главах:

$$H_p = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \sum_q [V_q b_q \exp(iqr) + V_q^* b_q^+ \exp(-iqr)] + \sum_q \hbar \omega_0 b_q^+ b_q, \quad (20)$$

а полная энергия системы записывается следующим образом:

$$J_p[\varphi(r)] = K - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} W_q^2 - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} \frac{[1 - W_q^2]^2}{1 - W_q^2 + \ell_0^2 q^2}. \quad (21)$$

В литературе приводятся расчеты энергии 2d-полярона, как методом интегралов Фейнмана (F), так и модифицированным методом Ли-Лоу-Пайнса (MLLP).

При расчете методом интегралов Фейнмана, получены следующие результаты:

$$E_p^F = \frac{(v-w)^2}{2v} - \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty dt \frac{\exp(-t)}{\sqrt{D(t)}}, \quad D(t) = \frac{w^2}{2v^2} t + \frac{v^2 - w^2}{2v^3} [1 - \exp(-vt)]. \quad (22)$$

Расчет модифицированным методом Ли-Лоу-Пайнса дает:

$$E_p^{MLLP} = \frac{\lambda}{2} - \alpha \int_0^\infty dt \frac{\exp(-(1-a)^2 t^2 / \lambda)}{1 + a^2 t^2}. \quad (23)$$

Где,  $\alpha, \lambda, a, t$  – обозначение и вариационные параметры. На рисунках 5 и 6 приведены графики зависимости энергии полярона от константы взаимодействия электрон-фононной связи.

Для двумерного биполярона большого радиуса, Гамильтониан полной энергии имеет следующий вид:

$$H_{bp} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{e^2}{\epsilon_\infty r_{12}} + \sum_q [V_q b_q (\exp(iqr_1) + \exp(iqr_2)) + V_q^* b_q^+ (\exp(-iqr_1) + \exp(-iqr_2))] + \sum_q \hbar \omega_0 b_q^+ b_q, \quad (24)$$

а полная энергия системы записывается следующим образом:

$$J_{bp} = K_1 + K_2 + V_{12} - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} W_q^2 - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega_0} \frac{[D_q - W_q^2]^2}{D_q - W_q^2 + 2\ell_0^2 q^2}. \quad (25)$$

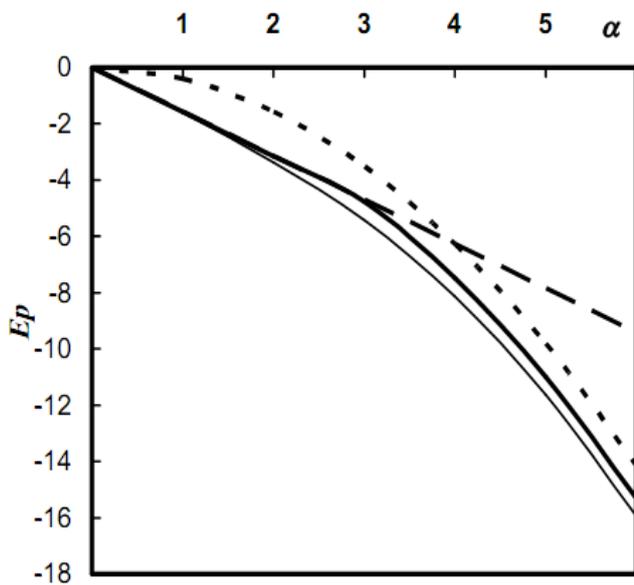


Рис.5. Зависимость энергии 2d-полярона от константы взаимодействия электрон-фононной связи: при сильной связи  $\alpha \gg \alpha_c$  (точки), при слабой связи  $\alpha \ll \alpha_c$  (штриховая линия) и при промежуточных значениях взаимодействия (толстая сплошная линия); Тонкая сплошная линия получена методом интегрирования Фейнмана по траектории.

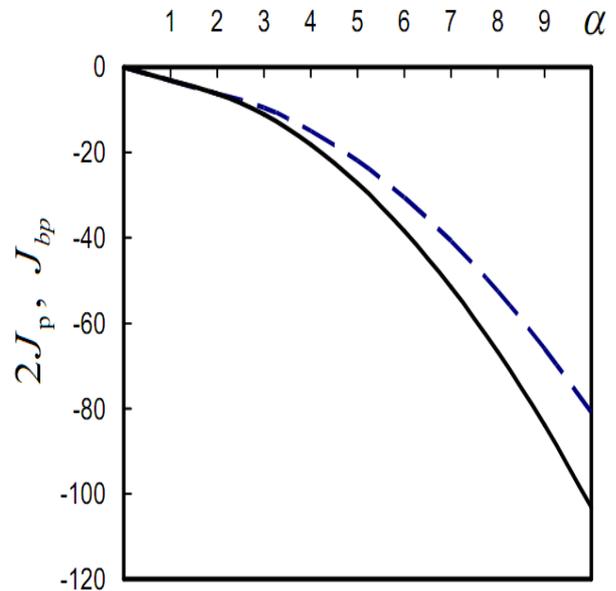


Рис.6. Полученная расчетом полной энергии 2d-биполярона функционалом и волновой функцией (сплошная линия), малая кривая, полученная расчетом энергии 2d-полярона функционалом Буймистрова-Пекара (штриховая линия):  $\beta = 1, \epsilon_\infty / \epsilon_0 = 0$ , энергия в  $\hbar \omega_0$  единицах.

Параметр отталкивания двух электронов определяется следующим выражением:  $\beta = 1/(1 - \epsilon_\infty / \epsilon_0)$ . В частном случае, в пределе  $\beta = 1, \epsilon_\infty / \epsilon_0 = 0$ , отношение энергии биполярона  $J_{bp}$  к удвоенной энергии  $2J_p$  является существенным параметром, и его величина, рассчитанная по формуле (4.23) при  $\alpha \rightarrow \infty, (g_q = 0)$ , имеет значение  $J_{bp} / 2J_p \approx 1.25$ . Здесь необходимо учитывать, что для адиабатического полярона  $J_p = -\pi \alpha^2 / 8$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенных исследований по изучению в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах экситонов большого радиуса,  $D^-$  центров, поляронов большого радиуса в квантовых точках, поляронов и биполяронов в двумерных системах, сделаны следующие выводы:

1. Проведен анализ полной энергии и энергии корреляции экситонов, находящихся в сферической квантовой точке с конечной высотой гетеробарьера. При расчетах рассмотрено два вида волновых функций - в приближении Хартри без корреляции и волновая функция с корреляционной поправкой.

2. С помощью координаты Хиллерас, численным методом определена полная энергия двумерного  $D^-$  центра и энергия связи электрона. В объемном случае определена энергия  $D^-$  центра, а в двумерном случае определена полная энергия  $D^-$  центра. Показано, что при уменьшении размеров пространства ( $3d \rightarrow 2d$ ), полная энергия  $D^-$  центра увеличивается почти в  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$  раза.

3. С помощью адиабатической модели проведен анализ энергии электрона при сжатии полярона в сферической квантовой точке с конечной глубиной потенциальной ямы, рассчитана его связь с радиусом квантовой точки. В данном случае, при сжатии квантовой точки до  $a \approx 3nm$ , энергия связи растет, а затем происходит ее уменьшение. Этот эффект объясняется тем, что электрон начинает туннелировать за пределы квантовой сферы, то есть происходит туннелирование в матрицу кристалла.

4. Разработаны методы оценок энергии полярона в квантовой точке, с учетом неадиабатических эффектов, с помощью аппроксимации Буймистрова-Пекара.

5. Показано, что в квантовой задаче поляронов с параболическим потенциалом, волновая функция фононов находится точнее, с помощью функции Грина. Для этого рассчитывается спектральный ряд функции Грина. Показано, что в случае сильного конфайнмента, электрон в квантовой яме движется быстрее и адиабатическое решение приближается к точному решению.

6. Проведен полный анализ неадиабатическим методом Буймистрова-Пекара при слабом, сильном и промежуточном значениях электрон-фононного взаимодействия полной энергии 2d-полярона и биполярона.

7. Определенное критическое значение  $\alpha_c = 2.94$  меньше критического значения для полярона в трехмерной модели  $\alpha_c(3d) \approx 6$ . Эти результаты показывают, что при уменьшении размеров пространства ( $3d \rightarrow 2d$ ), энергия полярона увеличивается.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.30.05.2018.FM./T.34.01 ON AWARDING  
OF SCIENTIFIC DEGREES AT PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE**  

---

**NAMANGAN STATE UNIVERSITY**

**INOYATOV SHUKURILLO TURGUNBOYEVICH**

**LARGE-RADIUS EXCITONS AND POLARONS IN LOW-DIMENSIONAL  
SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURES**

**01.04.10 – Physics of semiconductors**

**ABSTRACT OF DISSERTATION OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD) ON  
PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

**Tashkent – 2019**

**The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2019.1.PhD/FM318.**

Dissertation has been prepared at Namangan state university.

The abstract of the dissertation is posted in three languages (uzbek, russian, english (resume)) on the website ([www.fti.uz](http://www.fti.uz)) and the «Ziyonet» Information and educational portal ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)).

**Scientific supervisor:**

**Gulyamov Abdurasul Gafurovich**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

**Official opponents:**

**Razykov Tahirdjon Mutalovich**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician

**Rasulov Rustam Yavkachovich**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician

**Leading organization:**

**Tashkent University of information technology**

Defense will take place «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 at \_\_\_ at the meeting of Scientific Council number DSc.30.05.2018.FM/T.34.01 Physical-technical institute, Address: 100084, Uzbekistan, Tashkent, 2B Chingiz Aytmatov street. Phone/fax: (+99871) 235-42-91, e-mail: ftikans@uzsci.net.

Dissertation is possible to review in Information-resource centre at Physical-technical institute (is registered №\_\_\_) (Address: 100084, Uzbekistan, Tashkent, 2B Chingiz Aytmatov street. Phone/fax: (99871) 235-30-41.

Abstract of dissertation sent out on «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 year.

(Mailing report № \_\_\_\_\_ on «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 year)

**N.R.Avezova**

Chairman of scientific council on award of scientific degrees, DSc in techniques

**A.G. Komilov**

Scientific secretary of scientific council on award of scientific degrees, PhD in techniques

**A.V. Karimov**

Chairman of scientific Seminar under Scientific Council on award of scientific degrees, DSc in physics and mathematics, professor

## INTRODUCTION (abstract of PhD thesis)

**The main purpose of the research work:** Learning the dependence of the energy characteristics of excitons and polarons on the size of quantum dot in low-dimensional semiconductor heterostructures.

### **Objectives of the research:**

Calculation of the exciton energy in a heterobarrier spherical quantum dot with a finite height, determination of the dependence of the exciton energy on the radius of the quantum dot, comparing the results that were obtained with the experimental results in quantum dots based on CdS-SiO<sub>2</sub>, InGaN-SiO<sub>2</sub>, Si-SiO<sub>2</sub> and other experimental results;

Determination of the total energy of a two-dimensional center and the electron binding energy and comparison with other theoretical data;

Estimation of the polaron rise of the electron in a spherical quantum dot with a finite height in the adiabatic and non-adiabatic approximation; the solution of the Green function and the differential equation for the rise of phonon coordinates in a parabolic model of confinement;

Analysing by a variational method of energy of a two-dimensional polaron and a bipolaron, determining the condition for the occurrence of a stable bipolaron, comparing the results with the results of Feynman and Lee-Low-Pines.

**The object of the study:** D-centre in low-dimensional semiconductor heterostructures, excitons that are at quantum dots based on CdS-SiO<sub>2</sub>, InGaN-SiO<sub>2</sub>, Si-SiO<sub>2</sub>, polarons and bipolarons in two-dimensional space.

**The subject of the research:** Investigating the processes related to the dependence of the quasiparticles' energy located in low-dimensional heterostructures and in quantum dots on the radius of the quantum dot and the size of the quantum well.

**Research methods:** Methods of approximation of theoretical physics: Variational calculation, numerical method, mathematical modeling, spectral Green function.

### **The scientific novelty of the research is as follows:**

For the first time, the functional correlation energy for 1<sup>st</sup> level has been estimated by taking into account dynamic correlation in the trial exciton wave function in a quantum dot. The results agree well with the experimental data for quantum dots based on CdS-SiO<sub>2</sub>, InGaN-SiO<sub>2</sub>, Si-SiO<sub>2</sub> and with other theoretical results;

The total energy of a two-dimensional center and the electron binding energy in Hiller coordinates are numerically determined. It is shown that the total energy of the center equals and with decreasing space dimensions ( $3d \rightarrow 2d$ ), the ratio of energy is equal to almost  $E(2d)/E(3d) \approx 4.3$ ;

It was determined that for the separation of one electron in the center, energy is required and this value is closer compared to other research results;

It is shown that in the model of finitely high potential barrier, the found polaron shift monotonically increases with a decrease in  $a \approx 30 \text{ \AA}$  the radius of the quantum dot, and with a finitely high potential barrier, the polaron shift increases to and then

begins to decrease. This is due to the tunneling of the electron wave beyond the limits of the sphere;

The simple method is produced for determining polaron energy through calculating the Green function in the spectral expansion for solving the wave function of phonons in the polaron problem at a quantum dot with a parabolic potential determines the polaron energy more accurately than in other approximate methods;

The polaron energy was estimated by Buimistrov-Pekars' approximation taking into account non-adiabatic effects;

It is shown for the first time that the value of the total energy of the weak and strong electron-phonon interaction of a two-dimensional polaron calculated by Buimistrov-Pekar method for the non-adiabatic case is very close to the results which obtained by the Feynman method;

**The implementation of research results.** Based on the studying of the mechanisms of dependence of the energy of excitons in a spherical quantum dot on the radius of the quantum dot:

The results of the variational calculation of the 1<sup>st</sup> level of an exciton localized in a spherical quantum dot with a finite height heterobarrier were used in grant No: 13-02-00073 «First-kind quantum dots with an indirect in the quasi-momentum space of the conduction band structure» of the Institute of Semiconductor Physics. A.V. Rzhhanov SB RAS (certificate of the Institute of Semiconductor Physics AV Rzhhanov SB RAS dated June 9, 2019). These results made it possible to solve the problem of the dependence of the exciton energy on the radius of the quantum dot.

The results obtained when analyzing the variational calculation of the Coulomb and correlation exciton energy in a spherical quantum dot with a final heterobarrier were used in explaining the processes of the origin of cyclotron resonance in a quantum well in grant F-2-21 «Mathematical modeling of the density of surface states at the semiconductor-insulator interface» ( 2011-2016) (certificate of the Ministry of Higher and Secondary Special Education No. 89-03-2489 dated June 15, 2019). Using of scientific results can made it possible to determine the transport mass and the total concentration of electrons in a quantum well based on CdS-SiO<sub>2</sub>, InGaN-SiO<sub>2</sub> and Si-SiO<sub>2</sub>.

**Approbation of the research results.** The main results of the thesis were presented and discussed at 3 international and 4 republican scientific and practical conferences.

**Publication of the research results.** On the topic of the thesis, 15 scientific papers were published, of which 7 articles in journals, including 3 foreign and 4 republican journals recommended by the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan for publication of the main scientific results of the theses.

**The structure and volume of the dissertation:** The research paper consists of the introduction, four chapters, conclusion, appendix and bibliography. Dissertation includes 22 drawings, 4 tables and 105 pages.

**ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LISH OF PABLISHED WORKS**

**I бўлим (I часть; part I)**

1. Dzhumanov S., Vaimatov P.J., Inoyatov Sh.T., Djumanov Sh.S., Gulyamov A.G. Formation of intermediate coupling optical polarons and bipolarons in two-dimensional systems //Physics Letters A (Elsevier)– 2019. 383 (12), – P.1330-1335. (№3, Scopus, IF=2.08).
2. Байматов П.Ж., Гулямов А.Г., Иноятлов Ш.Т. Поляронное состояние в параболическом потенциале //Бухоро Давлат Университети илмий ахбороти – 2019. – 1-сон, – 28-31 бетлар. (01.00.00, №3).
3. Baymatov P.J., Inoyatov Sh.T. Influence of the Medium Polarization on the Energy of an Electron in a Quantum Dot //Ukrainian Journal of Physics – 2015. – V.60, N.3, – P.277-280. (№3, Scopus, IF=0.51).
4. Байматов П.Ж., Иноятлов Ш.Т. Оптическая щель в сферической квантовой точке //Uzbek Journal of Physics – 2012. – V.14, № 5-6 – p.286-291. (01.00.00, №8).
5. Ahmetoglu M. (Afrailov), Akay S.K., Baymatov P., Inoyatov Sh., Ahmedov O., Rahimov N., Pulatov A. Electron-hole interaction in spherical quantum dots of Nanoheterostructures //Optoelectronics and Advanced Materials - Rapid Communications – 2009. – V.3, N.3, – P.163-165. (№3, Scopus, IF=0.39) .
6. Байматов П.Ж., Иноятлов Ш.Т., Ахмедов О.Т. О состоянии континуального экситона полярона и D(-) центра при квантовом сужении //ВЕСТНИК НУУз. Физика – 2009. –№2, – С.140-145. (01.00.00, №5).
7. Байматов П.Ж., Иноятлов Ш.Т., Ахмедов О.Т. Поляронный сдвиг 1s-уровня электрона в сферической квантовой точке //Uzbek Journal of Physics – 2008. – V. 10, №3, – P.184-188. ( 01.00.00, №8).

**II бўлим (II часть; part II)**

8. Гулямов А.Г., Иноятлов Ш.Т., Байматов П.Ж., Рахимов Н.Б. О роли кулоновской взаимодействий электронов и дырок в сферической квантовой точке //Яримўтказгичлар физикаси ва курилмалари хамда уларни укитишнинг муаммолари. Худудий илмий анжумани материаллари, Наманган С 9-10. 2013.
9. Байматов П.Ж., Кучкаров Х.О., Гулямов А.Г., Иноятлов Ш.Т., Давлатов А.Б. К расчету энергетических уровней частиц анизотропной массой внутри наночастиц //IV Международная конференция по актуальным проблемам молекулярной спектроскопии и конденсированных сред. Самарканд, 29-31 май, ноябр, С.147 , 2013 г.
10. Байматов П.Ж., Иноятлов Ш.Т., Шералиев А.Х. Энергия основного уровня электрона с анизотропной массой в сферической квантовой точке //Междисциплинарные исследования в науке и образовании. Киев, 1 сентября 2012. URL: [www.es.rae.ru/mino/158](http://www.es.rae.ru/mino/158) С. 1125.

11. Байматов П.Ж., Гулямов А.Г., Мавлонов Х.Н., Иноятов Ш.Т. К теорию двумерного  $D^-$  центра //II международная конференция по оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро и наноструктурах. Ферганский политехнический институт. Фергана. Узбекистан. 2011.сентябр. F27. P. 92.

12. Байматов П.Ж., Иноятов Ш.Т., Мадаминов Х.М. Об устойчивости двух электронов в сферической квантовой точке. Фундаментальные и прикладные вопросы физики //Материалы четвертой международной конференции посвященной 80-летию академика М.С.Саидова. Ташкент, 2010, 24-25 ноябр, С.179 – 180.

13. Байматов П.Ж., Иноятов Ш.Т., Ахмедов О.Т. О двухэлектронных центров в 2d наногетероструктурах. Рост, свойства и применение кристаллов //Материалы IV –Республиканской научной конференции. Андижан 1-12 апрел, С. 28, 2008.

14. Байматов П.Ж., Ахмедов О.Т., Иноятов Ш.Т. Об электрон-фононной корреляции в теории полярона //Замонавий физиканингфундаментал ва амалий муаммолари мавзусидаги республика илмий-амалий конференция материаллари туплами. УзМУ.Ташкент , С.149. 2007.

15. Байматов П.Ж., Ахмедов О.Т., Иноятов Ш.Т. Корреляционные поправки к энергии адиабатического полярона //Замонавий физиканинг фундаментал ва амалий муаммолари мавзусидаги республика илмий-амалий конференция материаллари туплами. УзМУ.Ташкент 2007. С.151.

Авторефератнинг ўзбек, рус ва инглиз тилларидаги нусхалари  
«Тил ва адабиёт таълими» таҳририясида таҳрирдан ўтказилди.  
(21.08.2019 йил)

Босишга рухсат этилди: 19.09.2019 йил  
Бичими 60x44 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>, «Times New Roman»  
гарнитурда рақамли босма усулида босилди.  
Шартли босма табоғи 2,5. Адади: 100. Буюртма: № 125.

Ўзбекистон Республикаси ИИВ Академияси,  
100197, Тошкент, Интизор кўчаси, 68

«АКАДЕМИЯ НОШИРЛИК МАРКАЗИ»  
Давлат унитар корхонасида чоп этилди.