

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA
O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI
FARG'ONA DAVLAT UNIVERSITETI
FIZIKA kafedrası

E.L.IVCHENKO, R.Ya.RASULOV

NANOFIZIKAGA KIRISH



Farg'ona 2008



Mundarija

Kirish.....	4
1 bob. GETEROSTRUKTURALAR. O'TA PANJARALI YARIMO'TKAZGICHLAR.....	6
1.1. Geterostrukturalar va ularning tabaqalanishi (asoaiy tushunchalar).....	6
1.2. O'ta panjarali yarimo'tkazgichlarning tabaqalanishi (qisqacha tahlil)	10
2-bob. NANOSTRUKTURALARDA KVAZIZARRALAR	12
2.1. Kvantlashgan o'ralarda elektronli holatlarning o'lchamli kvantlashishi.....	12
2.2. Kvantlashgan iplar va nuqtalar	15
3-bob. O'LCHAMLI KVANTLASHGAN YARIMO'TKAZGICHLI TIZIMLAR.....	18
3.1. Past o'lchamli tok tashuvchilarning energiyaviy spektri	18
3.2. Past o'lchamli tok tashuvchilarning statistikasi	21
3.3. $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ strukturalarda ikki o'lchamli elektronlarning fononlarda sochilishi	23
4-bob. YARIMO'TKAZGICHLI NANOSTRUKTURALARDA TOK TASHUVCHILARNING ENERGIYAVIY SPEKTRLARINING HISOBLASH USULLARI	27
4. 1. Oddiy zonali yaqinlashish	27
4.2. Murakkab zonali yaqinlashish.....	33
4.3. Keyn modelida o'lchamli kvantlashish.....	40
4.4. Ko'chirish matritsasi metodi. o'ta panjaralarda kvazizarralar	42
4.5. O'lchamli kvantlashgan elektronlar	44
ADABIYOTLAR.....	46



Kirish

Oxirgi yillarda yarim o'tkazgichlar fizikasi va texnologiyasi shu darajada rivojlana bordiki, yarim o'tkazgichlar fizikasining yangi–keng qamrovli sohasi–*yarim o'tkazgichli past o'lchamli tok tashuvchilar fizikasi* dunyoga keldi¹. Bu fan nanofizika deb yuritilmoqda. Bu soha nanostrukturalardagi tok tashuvchilar tizimining hamda ular ishtirokidagi jarayonlarning fizikaviy tabiati bilan shug'ullanadi². Nanostrukturada tok tashuvchilarning harakati, hech bo'lmasa, biror yo'nalish bo'yicha chegaralangan bo'lib, o'sha yo'nalishda o'zining blox tok tashuvchisi ekanini unutadi, ya'ni shu (tanlangan) yo'nalish bo'yicha o'lchamli kvantlashish sodir bo'ladi. Bu yo'nalishda tok tashuvchilarning nafaqat impulsi va energiyaviy spektri o'lchamli kvantlashgan bo'ladi, balki, uning samaraviy (effektiv) massasi o'lchamli kvantlashadi. Bu esa tok tashuvchilar energiyaviy spektrining keskin o'zgarishiga, bu, o'z navbatida, yarim o'tkazgichli past o'lchamli strukturalarda qator fizikaviy hodisalarning keskin tabiatli bo'lib qolishiga olib keladi. Ana shunday tabiatli fizikaviy jarayonlardan aqli foydalanish tufayli, ayni paytda, nanonuçtalar va nanoo'ralarga asoslangan yangi tabiatli $l > 5 \text{ nm}$ to'lqin uzunlikli infraqizil (IQ) sohada ishlovchi lazerlar hamda diskret kompyuterlar dunyoga keldi.

Past o'lchamli tok tashuvchilar tizimi xususiyatlariga ko'ra tavsiflanadigan yupqa qatlam yoki simlar elektr qarshiliklarining hajmiy namunalarga nisbatan katta farq qilishi o'tgan asrning boshlaridayoq ma'lum edi. Bu hodisani nazariy jihatdan J.J.Tomson o'ziga xos hisoblashlardan foydalangan holda tushuntirgan. Bunda elektronlar tizimi ideal gaz sifatida modellashtirilgan edi. Bu modelga asosan hajmiy namunalarda elektr qarshilik elektronlarning namuna ichidagi (ya'ni hajmiy) sochilish jarayonlari bilan tavsiflansa, ingichka simlarning elektr qarshiligi ikki yoki bir o'lchamli elektronlarning kristall sirtidan sochilishi bilan bog'langandir. Hajmiy elektr qarshilikning sirt hisobiga ortgan qismi tok tashuvchilar impulsining sirtida sochilish evashiga o'zgarishi bilan tushuntiriladi. SHu sababdan elektr qarshilikning o'zgarish miqdori namuna qalinligi(d)ning tok tashuvchilarning erkin yugurish yo'li(l)ga qiymat jihatidan yaqinlasha borgan sari sezilarli bo'la boshlaydi. Bu hodisa, ayrim hollarda, *o'lchamli hodisalar* deb nomlanadi. Bunday jarayonlarni o'rganish qattiq jismlar fizikasi fanida yangi yo'nalish «Sirt fizikasi» va «Past o'lchamli tok tashuvchi(elektron)lar fizikasi» kabi alohida yo'nalishlarga asos solinishiga sabab bo'lgan.

Shu mazmunda kitobning tuzilishi quyidagicha tanlandi:

1-bobda har xil ko'rinishdagi geterostrukturalar va o'ta panjaralar³ning qisqacha fizikaviy tahlili keltirilgan. Bunda qaralatyotgan nanotizimlar va ularda kechadigan fizikaviy

¹ O'lchamlari bir necha nanometr ёki nanometrning ulushlariga teng bo'lgan strukturalar nanostrukturalar, ular haqidagi fiika esa nanofiika deb yuritiladi.

² Bu yerda shuni qayd qilish o'rinliki, mikroelektronika sohasida, asosan, tok tashuvchilarning iaryadi hisobiga kechadigan hodisalar qo'llanilgan bo'lsa, hoiirgi iamon elektronikasi(fan va texnologiyasi)da tok tashuvchilarning nafaqat iaryadi, balki uning spiniga asoslangan elektronika bo'limi ham do'nёga keldi. Elektronikaning bu bo'limi spintronika deb yuritilmoqda.

³ O'ta panjaralarga davriy tarida sun'iy hosil qilingan qatlamlar tg'io'imi, shuningdek har qo'shni qatlam o'iining fiiko-kimёviy xususiyatlari bilan farqlanuvchi, biroq qatlamlar kristall panjaralar doimiyliklari miqdoran juda yaqin qiymatli bo'lgan tiim(namuna) tushuniladi. Bu haqda kengroq ma'lumot 1-bob boshlanishida keltirib o'tilgan.



jarayonlarni soddaroq holda tushuntirish imkonini beruvchi oddiy modellari keltirilgan va ularning tahlillari soddada bayon etilgan.

2-bobda nanostrukturalarda kechadigan anomal jarayonlarning hamda murakkab zonali yarim o'tkazgichlardan olingan nanostrukturalardagi kavaklarning tabiati (energiyasi, to'liqin funksiya va hk.) nazariy fizikada qo'llaniladigan murakkab matematikaviy apparatni bilishning talab qilinishi e'tiborga olingan. Shu sababli bunday murakkab tabiatli hisoblashlarni va ularning tahlillarini soddaroq tushunish va tushuntirish maqsadida 2-, 1-o'lchamli kvantlashgan tizimlar fizikaviy tabiatini soddada holda qamrab olgan modellar va ularning qisqacha tahlillari keltirilgan.

3-bobda o'lchamli kvantlashgan strukturalar sifatida yakka tartibdagi *kvantlashgan o'ra* (KO') yoki ma'lum potentsial to'siqlar orqali davriy takrorlanuvchi KO'lar to'plami *o'ta panjarali yarim o'tkazgichlar* tushuniladi. Shu sababdan dastlab *o'ta panjarali yarim o'tkazgichlar* (o'ta panjarali yarimo'tkazgich)dagi elektronli holatlar nazariy qaralgan. So'ngra ayrim olingan o'lchamli kvantlashgan cheksiz chuqurlikli potentsial o'radagi tok tashuvchilarning statistikasi tahlil etilgan.

4-bobda nanostrukturalar hosil qilingan asos (taglik) yarim o'tkazgichlarning zonaviy tuzilishiga mos holda tanlanadigan ikki xil hisoblash usullari: oddiy va murakkab zonali yaqinlashishlar bayon etilgan. Bunda, hajmiy yarim o'tkazgichlardan farqli o'laroq, namunaning o'lchamiga bog'liq kvantlashgan energiyaviy sathlarning yuzaga kelishi, bunday hollarda, hatto tok tashuvchilar effektiv massalarining ham karalayotgan o'lchamli kvantlashgan energiyaviy sathlarning tartib raqamiga bog'liqligi ko'rsatilgan. Bu o'rinda shuni ta'kidlash o'rinliki, masalan hajmiy yarim o'tkazgichlarda optik o'tishlar faqatgina zonalarini tashkil etuvchi energiyaviy tarmoqlar orasidagina kechsa, o'lchamli kvantlashgan potentsial o'rali yarim o'tkazgichlarda qo'shimcha-o'lchamli kvantlashgan energiyaviy sathlararo ham optik o'tishlar sodir bo'ladi⁴.

Shuni ham qayd qilish o'rinliki, adabiyotlar ro'yxati yordamchi adabiyotlar tarzida berilgan bo'lib, ulardan aniq bir tanlangan mavzuni yanada chuqurroq o'rganish talab etilgan hollarda foydalanishni tavsiya etamiz.

Ushbu adabiyot yarim o'tkazgichlar fizikasining dolzarb masalalari bo'yicha ilmiy-tadqiqot ishlari olib borish niyatidagi iqtidorli bakalavr va magistrantlar⁵ga mutaxassislik fanlari adabiyoti tarzida, shuningdek shu sohada tadqiqot olib borayotgan aspirantlar, doktorantlar va ilmiy xodimlarga uslubiy ko'rsatma sifatida ham foydalanish tavsiya etiladi.

Fizikaning dolzarb masalalari bo'yicha mashg'ulotlar olib borayotgan professor-o'qituvchilar uchun ham foydadan xoli bo'lmaydi degan umiddamiz.

Ushbu kitob O'zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalari qumitasui hamda Respublika Fanlar Akademiyasining fundamental fanlarni qo'llab-quvvatlash fondi grantlari tomonidan qisman moliyalashtirilgan.

⁴ Oxirgi hol alohida tabiatli tur-qo'shimcha optik o'tishlar bo'lib, ular qator optik va fotogalvanik hodisalar⁴ga o'ilarining seiilari, ayrim hollarda anomal(keskin tabiatli) ulushlarini qo'shishi mumkindir.

⁵ Bu yerda yarim o'tkaigichlar fiikasi, qattiq jismlar fiikasi, naiariy fiika kabi mutaxassislik magistrantlari naiarda tutilmoqda.



1 bob. GETEROSTRUKTURALAR. O'TA PANJARALI YARIMO'TKAZGICHLAR

1.1. Geterostrukturalar va ularning tabaqalanishi (asoaiy tushunchalar)

Ayni paytda past o'lchamli yarimo'tkazgichlar fizikasida terminlar va tushunchalar-ning qator tizimi shakllangan. Birinchidan o'lchamli kvantlashgan tizimlarning quyidagi sistematikasi shakllandi (qavslarning ichida so'zlarning inglizcha yozilmasi keltirilgan):

- kvantlashgan o'ralar (*quantum wells*);
- kvantlashgan simlar (*quantum wires* va *quantum well wires* yoki *QWWs*);
- kvantlashgan nuqtalar (*quantum dots* yoki *QDs*);
- o'ta panjaralar (*superlattices* yoki *SLs*);
- ikki yoki uch to'siqli rezonansli-tunnel strukturalar (*double – and triple – barrier resonance – tunneling structures*);
- ikkilangan kvantlashgan o'ralar (*double quantum well*);
- antinuqtalar (*antidots*);
- delta legirlangan strukturalar (*d – doped structures*);
- kvantlashgan mikrorezonatorlar (*quantum microcavities*);
- fotonli kristallar (*photonic crystals*);
- I va II tur geterostrukturalar (*type – I and type – II heterostructures*);
- po'kakli yarim o'tkazgichlar;
- fulleronlar, nanoklasterlar, nanotrubalar, nanokontaktlar va boshqalar.

Ikkinchidan quyida keltirilgan strukturalarda kvantlashgan holatlarning sistematikasi (tizimi) ishlab chiqilgan:

- erkin tok tashuvchilar va eksitonlarning o'lchamli kvantlashish holatlari, zonachalar (alohida olingan zona tarmoqlari) va minizonalar;
- o'lchamli kvantlashgan optik fononlar, interfeys fononlari;
- "siniq" spektrli akustik fononlar (*folded acoustic phonons*);
- ikki o'lchamli magnit polaron;
- kompozit fermionlari va kvantlashgan Xoll effektidagi chetki holatlar.

Quyida har xil-tabiatan farq qiluvchi geterostrukturalarni aniq bir tartibda sanab o'tamiz va ularga qisqacha tavsif beramiz. Bu hol quyida qayd qilinadigan tushunchalar o'rtasidagi farqni hamda o'zaro bog'liqlikni tushunishni osonlashtiradi.

Ko'p qatlamli geterostrukturalar energiyaviy spektrining tipik ko'rinishi 1-4 rasmlarda keltirilgan. Ulardagi pastki va yuqorigi chiziqlar, mos holda, valent zona shipining va o'tkazuvchanlik zonasi tubining struktura bosh o'qi yo'nalishidagi fazoviy bog'lanishini tasvirlaydi.



Past o'lchamli tok tashuvchilar sistemasini yuzaga keltiruvchi geterostrukturalar va o'ta panjaralarni tabaqalanishini yakkalangan geteroo'tik (*single heterojunction*⁶, 1-rasm) dan boshlagan ma'qul. Bunday geteroo'tik fizikaviy va kimyoviy ikki xil tabiatli A va B yarim o'tkazgichlarning kompozitsiyasi tufayli, masalan *ABA* yoki *BAB* (1-rasm) ko'rinishda hosil bo'lishi mumkin. Ularga misol keltiraylik: $Ga / Al_x Ga_{1-x} As$, $CdTe / Cd_{1-x} Mn_x Te$, $InAs / AlSb$, $Zn_{1-x} Cd_x Se / ZnS_y Se_{1-y}$, $ZnSe / BeTe$, $ZnSe / GaAs$, $Ga_{1-x} In_x As / InP$, $Si_{1-x} Ge_x / Si_{1-x} C_y$, $In_{1-x} Al_x As / Ga_{1-y} Al_y As$ Bu tizimda bitta yoki ikkala kompozitsiya materiali ham qattiq aralashma bo'lishi mumkin. Bunday holda x, y yoki $1-x, 1-y$ aniq bir nav atomlarning kristall panjara tugunlaridagi ulushini anglatadi.

Umuman olganda, biror bir kompozitsiya material ta'qiqlangan zonasi (E_g - ta'qiqlangan zona kengligi) boshqasining ta'qiqlangan zonasi ichida joylashgan (masalan, $GaAs / Al_{0.35} Ga_{0.65} As$ (1a-rasm) strukturadagi singari) va bir material o'tkazuvchanlik zonasi tubidan ikkinchi material valent zonasi shipi $InAs / AlSb$ yoki $ZnSe / BeTe$ (1b-rasm) strukturadagi kabi, yuqorida bo'lishi mumkin.

Ta'qiqlangan zonalari biri ikkinchisini yopadigan II tur geterostrukturalardan tashqari ta'qiqlangan zonalari biri ikkinchisini yopa olmaydigan geterostrukturalar ham bo'lishi mumkin. Ikkinchi holda birinchi yarim o'tkazgich o'tkazuvchanlik zonasi tubi ikkinchi yarim o'tkazgich valent zonasining shipidan pastda joylashgan bo'ladi. Bunday hol, masalan, $InAs / GaSb$ strukturada uchraydi. Strukturadagi biror bir yarim o'tkazgich tirgishsiz bo'lsa (masalan $HgTe / CdTe$ strukturadagi kabi), u holda ular uchinchi tur geterostrukturalar turkumiga kiradi.

Endi birinchi tur ikkilangan geteroo'tiklar (*double heterojunction*) ni ko'raylik. Bunday strukturalarni *BAB* kabi tasvirlasak, kompozitsiya materiallarida bittasining E_g ta'qiqlangan zonasi kengligi ikkinchisining ta'qiqlangan zonasi ichida joylashgan bo'ladi. Bulardagi tok tashuvchilar uchun potentsial o'ra bittagina material (yarim o'tkazgich) sohasida joylashgan bo'ladi. Masalan $Al_{1-x} Ga_x As - GaAs - Al_{1-x} Ga_x As$ strukturadagi potentsial o'ra $GaAs$ materialda joylashgan bo'ladi ($x < 0,4$). Aytaylik *A* va *B* yarim o'tkazgichlarning ta'qiqlangan zonalari kengligi $E_g^A < E_g^B$ shartni qanoatlantirsin (2a-rasm)⁷. U holda *BAB* strukturada *A* yarim o'tkazgich sohasida potentsial o'ra hosil bo'lib, *A/B* tutashgan sirt (*interface*) da elektronlar uchun V_c , kavaklar uchun V_h balandlikli potentsial to'siqni hosil qilib, ular

$$V_c = E_c^B - E_c^A,$$

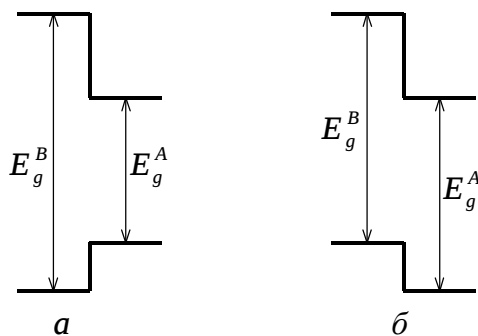
$$V_h = E_v^A - E_v^B.$$

⁶ To'g'ri burchakli va cheksiz energiyali chuqurlikni geteroo'tikni «kvant mexanikasi» fanida potentsial o'ra, «Qattiq jismlar fiikasi» fanida esa o'lchamli kvantlashgan potentsial o'ra deb nomlanadi.

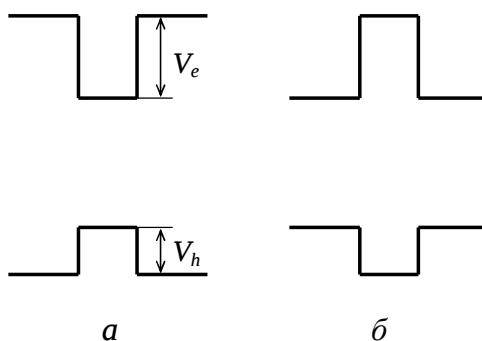
⁷ *BAB* tiimda $E_g^B < E_g^A$ shart bajarilsa, u holda *A* yarim o'tkaigich sohasi tok tashuvchilar uchun potentsial to'siq rolini o'ynaydi va V_c, V_h kattaliklar esa manfiy qiymatli bo'lib qoladi (2b-rasm).



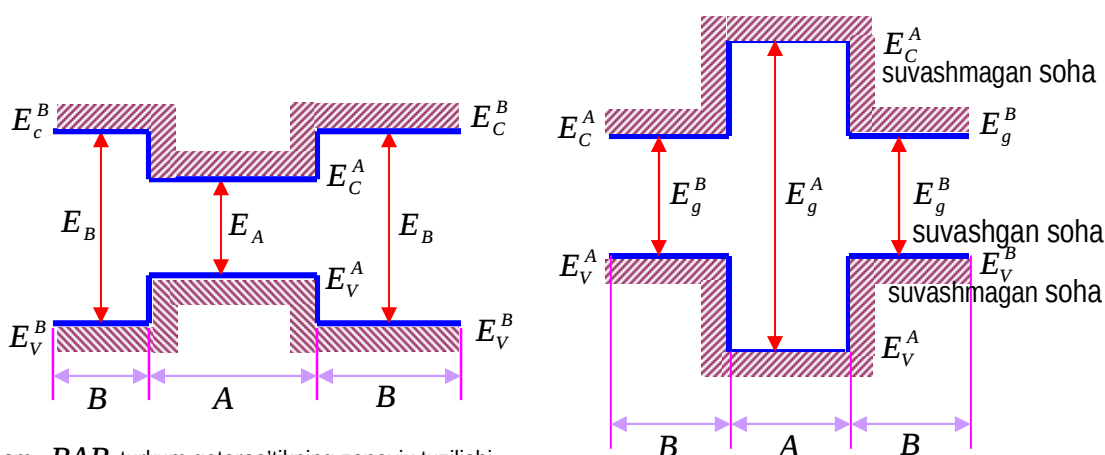
munosabatlar yordamida aniqlanadi. $E_c^{A(B)}$ va $E_v^{A(B)}$ mos holda $A(B)$ yarim o'tkazgich o'tkazuvchanlik zonasining shipi va valent zonasining bo'sag'asidir: $V_c + V_h = E_g^B - E_g^A$.

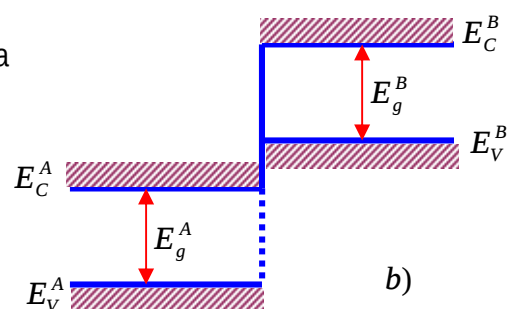
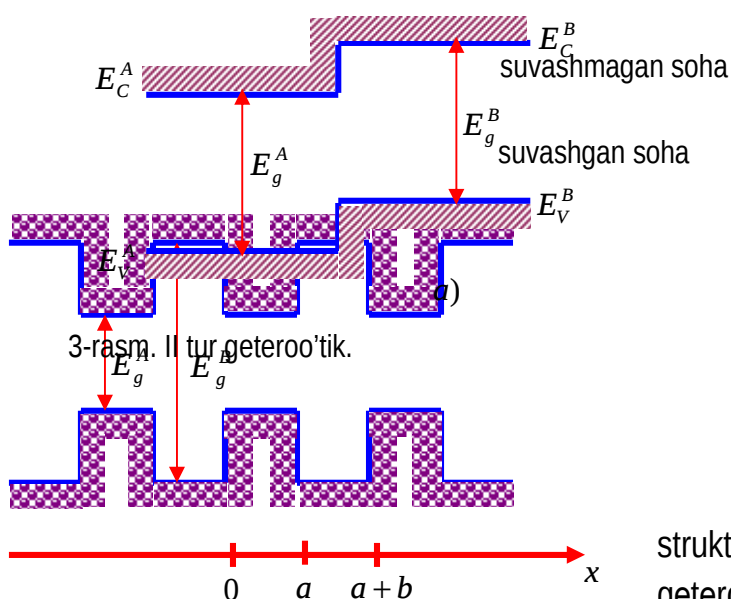
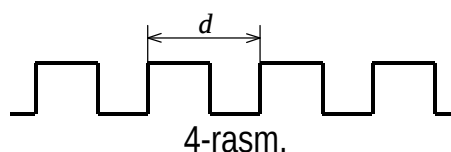
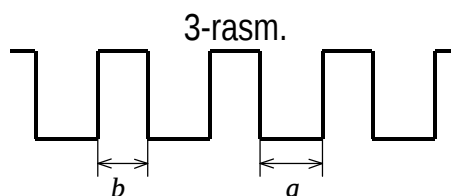
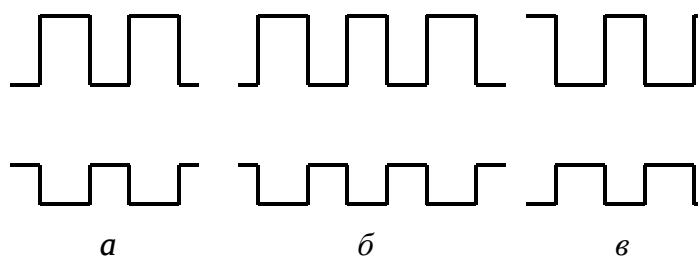


1-rasm.



2-rasm.

2a-rasm. BAB turkum geteroo'tikning zonaviy tuzilishi.a) $E_c^B > E_c^A$ 2b-rasm. b) $E_g^B < E_g^A$ 



4-rasm. Ko'p kvant o'rali (multiple QWs) yoki ko'p potensial to'siqli (multiple barriers) strukturaning zonaviy tuzilishi.

Xususan $GaAs/Al_{0,6}Ga_{0,4}As$ struktura uchun $V_e/V_h \approx 1,5$. II tur geteroo'tiklarda A yarim o'tkazgich o'tkazuvchanlik zonasining shipi B yarim o'tkazgichnikidan pastda tursa (energiya fazosida), valent zonalarning bo'sag'alari aksincha joylashgan bo'ladi. Bunday

strukturalar sirasiga $GaAs - Al_{1-x}Ga_xAs$ ($x > 0,4$), $INb - AlSb$ $ZnSe - BeTe$ tizimlar kiradi; ularning ta'qiqlagan zonalari «suvashgan», ya'ni birining ta'qiqlangan zonasi ikkinchisining berkitgan (ustini qoplagan) bo'ladi (3-rasm). Masalan $InAs/AlSb$ tizimda bir yarim o'tkazgich o'tkazuvchanlik zonasining shipi ikkinchisining valent zonasi bo'sag'asidan ham pastda bo'lganligi sababli, ta'qiqlangan zonalar umuman suvashmagan bo'ladi.

III tur geteroo'tiklarning bitta qatlami tirqishsiz ($E_g = 0$) yarim o'tkazgich bo'ladi, masalan $HgTe - CdTe$.



Shunday qilib, I tur ikkilangan geteroo'tikli (*double heterojunction*) *BAB* tizimda: $E_g^A < E_g^B$ shart o'rinli bo'lsa, u holda struktura yakkaqlangan kvant o'rali, $E_g^A > E_g^B$ shartni qanoatlantiradigan struktura esa ikkilangan potentsial to'siqli bo'ladi.⁸ II tur ikkilangan geteroo'tikli strukturalarda bir tur tok tashuvchilar (masalan, elektronlar) uchun kvantlashgan o'ra mavjud bo'lsa, u holda ikkinchi tur tok tashuvchilar (masalan, kavaklar) uchun potentsial to'siq mavjud bo'ladi.

Shuni qayd qilish mumkinki, ikki (double) va uch to'siqli (triple barrier) strukturalar yaratilishi bir (yakkaqlangan) to'siqli strukturalar yaratilishining mantiqiy davomidir⁹. Ayrim hollarda ko'p sonli kvant o'rali strukturalarda potentsial to'siqlar tok tashuvchilarning bir o'radan ikkinchisiga tunelli o'tish imkonini bermaydi. Bunday hollarda ikki zarrachali (masalan, eksitonlar), uch zarrali (masalan, trionlar) uyg'onishlar bir biri bilan qo'shimcha bir zarra (masalan, foton yoki fonon) orqali bog'lanish imkonini yaratadi. Bu esa (hajmiy kristallarda kechadigan jarayonlardan tubdan farq qiluvchi yangi tabiatli, hech bo'lmasa, keskin, tabiatli hodisalarning namoyon bo'lishiga olib keladi. Tabiiyki, yakkaqlangan (masalan, *BAB*) tizimning xususiyatidan ko'p qatlamli (masalan, *BABABA.....*) tizimning xususiyati tubdan farqlanadi.

Shuni ham qayd qilish o'rinliki, potentsial to'siqlarni ko'p qatlamlashtirish ulardan tok tashuvchilar uchun tunel o'tish imkonini beradi. Bunday ko'p qatlamli tizimlarga zarurat tug'ilgandagina alohida to'xtalamiz.

1.2. O'ta panjarali yarimo'tkazgichlarning tabaqalanishi (qisqacha tahlil)

Ayni paytda yarim o'tkazgichli past o'lchamli tok tashuvchilar sohasida nanofizika, nanotexnologiya, nanooptika va hatto nanobiologiya hamda nanotibbiyot (nanomeditsina) kabi terminlar majmuasi vujudga keldi va mutaxassislar tomonidan erkin foydalanib keldi.

Shuni qayd etish o'rinliki, nanostrukturalarning geometriyaviy o'lchamlarini va nanob'ektlarning konstruktsiyalarini avvaldan tanlagan holda o'zgartirish imkonining mavjudligi uning fizikaviy parametrlarini avvaldan kerakli tarzda o'zgartirish imkonini beradi¹⁰.

Shuni qayd etish joizki, *o'ta panjarali yarim o'tkazgichlar* deyilganda o'z kristall (davriy) potentsialidan tashqari bir (yoki ikki, yoxud uch) o'lchamli, davri kristall panjarasidan sezilarli katta bo'lgan «*begona*» *potentsialli kristall* tushuniladi. Bunday hol nazariy jihatdan L.V.Keldish tomonidan 1962 y. asoslab berilgan bo'lib, u «*begona*» potentsialni kristallni davriy deformatsiyalovchi katta quvvatli, turg'un ultratovush yordamida olishni taklif etgandi¹¹.

Kristall strukturasida begona potentsialni yana bir necha yo'llar bilan hosil qilish mumkin. Bu holda: a) agar bu potentsial kimyoviy jihatdan ikki hil yarim o'tkazgichlarning davriy takrorlanib keluvchi yupqa qatlamlarni ustma-ust o'stirish yo'li bilan hosil qilinsa, u holda o'ta panjarali yarim o'tkazgich kompozitsiyaviy o'ta panjarali yarimo'tkazgich deb

⁸ Umuman olganda, tok tashuvchilarning bir, ikki, uch o'lchamli harakati cheklangan tiim kvant (ëki kvantlashgan) o'ra (ip, nuqta) deb yuritiladi. tok tashuvchilar tiimini esa, mos holda, ikki (bir, nol) o'lchamli tok tashuvchilar tiimi deb nomlanadi.

⁹ Bu gap ikki (double) va uchta (triple) ëki butun sondagi kvant o'ra (multiple quantum wells (QW))li tiilmalar uchun ham o'rinlidir.

¹⁰ Albatta, ma'lum bir chegarada.

¹¹ A.A. Kastalskiy esa turg'un yorug'lik to'liqini yordamida ham «*begona*» potentsial olish mumkinligini ko'rsatib o'tgan.



yuritiladi; B) agar bu potentsialni legirlanish turini davriy o'zgartirish, masalan, ketma-ket davriy takrorlanuvchi n -va p -tur gomogenli hajmiy yarim o'tkazgichlar hisobiga yuzaga kelsa, u holda bunday o'ta panjarali yarimo'tkazgichlar majmuasini **legirlangan o'ta panjarali yarimo'tkazgich** deyiladi. Shuni qayd etish ma'qulki, kompozitsiyaviy o'ta panjarali yarimo'tkazgichlardan qatlamlar kimyoviy tarkibining davriy o'zgarishi bilan ta'qiqlangan zonalarining kengligi ham davriy o'zgarib boradi. Shuning hisobiga tok tashuvchilar uchun «begona», qo'shimcha potentsial hosil bo'ladi.

Legirlangan o'ta panjarali yarimo'tkazgichlarda ta'qiqlangan energiyaviy soha kengligi kristall bo'ylab o'zgarmas qolsa-da, ionlashgan aralashmalar yoyinki hajmiy (yuzaviy, chiziqli) davriy takrorlanuvchi zaryadlangan sohalaridagi elektrostatik potentsialning mavjudligi «begona», qo'shimcha potentsialning yuzaga kelishiga sabab bo'ladi.

Texnologiya nuqtai nazaridan kompozitsiyaviy va legirlangan o'ta panjarali yarimo'tkazgichlarni hosil qilish metodini 1970 y. Yosaki va Tsu berishdi. Ular asosan kompozitsiyaviy o'ta panjarali yarimo'tkazgichlar qatlamlarini elektronning erkin yugurish yo'llidan kichik qilib tayyorlashni va bunday hollarda, sun'iy hosil qilingan «begona» potentsialning ta'sirida hajmiy kristallning tabiatiga mos kelmaydigan kinetik xodisalarning kyeichishini o'qitirib o'tdilar.

1971 y. Yu.A. Romanov tomonidan legirlangan o'ta panjarali yarimo'tkazgichlarning qator xususiyatlari batafsil o'rganilgan, jumladan, *nipi*-davriy kristallarning o'zlariga hos fizikaviy tabiati birinchi bo'lib nazariy tahlil etilgan.

Ayni paytda bir necha atomlar o'lchamidagi toza sirtli kristallarni olish texnologiyaviy jarayonlar o'tkazish imkoni mavjud. Bu esa fizik tabiati oldindan kelishilgan o'ta panjarali yarimo'tkazgichlar olish imkonini beradi. Masalan molekulyar-nurli epitaksiya usuli yordamida *GaAs-AlGaAs*, *InSb-GaSb* sistemalarda o'ta panjarali yarimo'tkazgich o'stirilgan.

Odatda, o'stirilgan ko'pgina kompozitsiyaviy o'ta panjarali yarimo'tkazgichlarda qatlamlar qalinligi (bir necha yuz angstrom) elektronlarning erkin yugurish masofasiga nisbatan kichik tanlanganligi sababidan, qatlam sirtiga tik yo'nalishda o'lchamli kvantlashgan hodisa sodir bo'ladi. Bu yo'nalishga tik qolgan ikki yo'nalishda kristall o'z xususiyatini saqlab qoladi.

Ayni vaqtda spinli o'ta panjarali yarimo'tkazgichlar-magnitli va magnitsiz aralashmali yarim o'tkazgich qatlamlarining ketma-ket davriy joylashgan to'plami ham, shuningdek qutblangan o'ta panjarali yarimo'tkazgichlar, ya'ni yuqori kristall indekslarga ega bo'lgan sirtlar ham o'ta panjarali yarimo'tkazgich tabiatli bo'lishi mumkinligiga aniqlangan.

Yaqinda *CdTe-Cd_{1-x}Mn_xTe* asosida o'stirilgan tizimda ham yarim-«begona» potentsialni yuzaga keltirib o'ta panjarali yarimo'tkazgich olindi.

Al va *Ga* elementlarining valentligi va ionli radiuslari bir-biriga juda yaqin. Shu sababdan *GaAs* kristalliga kiritilgan *Al* miqdoriga qarab potentsial to'siq balandligini ham tanlash mumkin.

GaAs birikmasining ko'pgina fizikaviy, kimyoviy va texnologiyaviy xususiyatlari keng qamrovli tarzda o'rganilganligi bois kelgusida, asosan, unga asoslangan o'ta panjarali yarimo'tkazgichlarga nisbatan tekshirish olib boramiz.



2-bob. NANOSTRUKTURALARDA KVAZIZARRALAR

Kvantlashgan o'ralarda elektronli holatlarning o'lchamli kvantlashishini e'tiborga olgan holda tok tashuvchilarning energiyaviy spektrini hisoblash oddiy hisoblashlar turkumiga kirmaydi. Shu sababli bunday hisoblashlarni, ayniqsa, miqdoriy hisoblashlarda elektron hisoblash mashinalariga murojaat etishga to'g'ri keladi, chunki ularda hisoblashlarni katta aniqlik bilan olib borish imkonini beruvchi maxsus hisoblash dasturlari mavjud. Xususan nanostrukturalardagi kvantlashgan holatlarni psevdopotentsialli mikroskopik model yoki kuchli bog'lanish metodlardan foydalanib hisoblash va ularni miqdoran tahlil qilishning usullari anchayin ko'p. Biroq, baribir, bunday hisoblash usullari talab darajasidagi aniqlik bilan hisoblashlarni olib borish imkonini beravermaydi. Shuningdek bu hisoblash metodlari qandaydir simmetriyali holatlar uchun katta aniqlik bilan hisoblash imkonini bersa-da, boshqa bir simmetriyali holatlar uchun esa o'zlik qilib qoladi. Bunday hollarda hajmiy yarim o'tkazgichlarning zonaviy tuzilishini hisoblashda ishlatiladigan metodlardan: oddiy zonali yaqinlashishda effektiv massa yoki murakkab zonali yaqinlashishda effektiv gamiltonian metodi, ko'p sonli zonali yaqinlashishda esa Keyn modelidan (ayniqsa, masalan, Brillyuen zonasi markazi yaqinidagi sohalar uchun) foydalanish anchayin qulay va aniqlik darajasi yyetarli darajada yuqori bo'ladi.

Taqribiy hisoblashlarda ko'p qatlamli strukturalarning har bir qatlamidagi elektronli holatlar hajmiy yarim o'tkazgichdagi elektronli holatlarning chiziqli kombinatsiyasi sifatida qaralishi mumkin. Bunday hollarda geteroo'tish tekisligining ikki tarafida olingan to'lqin funksiyalarning shu tekislikda o'zaro "silliqlik ulanishi (tikilishi)" to'lqin funksiyalarning uchrashish nuqtasidagi miqdoran tengligi hamda ularning normal koordinataga nisbatan olingan hosilalarining shu nuqtada o'zaro tengligi bilan ifodalanadigan chegaraviy shartlar yordamida aniqlanadi.

2.1. Kvantlashgan o'ralarda elektronli holatlarning o'lchamli kvantlashishi

Effektiv massa metodi yordamida hisoblanadigan yarim o'tkazgichli nanostrukturalardagi elektronli holatlar, ma'lum bir ma'noda, kvant mexanikasi fanida zarraning bir o'lchamli harakati mavzusida tahlil etilgan. Kelgusida eng sodda holni-cheksiz balandlikka ega bo'lgan o'lchamli kvantlashgan potentsil o'radagi zarraning harakatini qaraylik. Bunda zarraning egiluvchan to'lqin funksiyasi

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(q_x x + q_y y)} j(z), \quad (2.1.1)$$

ko'rinishda bo'ladi, $q = (q_x, q_y)$ – zarraning interfeys tekisligi bo'yicha harakatini ifodalovchi ikki o'lchamli to'lqin vektori.

$B/A/B$ tur strukturalarda

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A} \frac{d^2}{dz^2} \varphi(z) = E_z \varphi(z)$$



ko'rinishdagi bir o'lchamli Shredinger tenglamasining yechimi bo'ladi; m_A -strukturaning A qatlamidagi zarra effektiv(samaraviy) massasi¹². Zarraning to'liq energiyasi E esa o'lchamli kvantlashgan E_z hamda $E_{xy} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_A}$ ko'rinishdagi kinetik energiyalarning yig'indisidan iborat.

Bunda E to'liq energiya miqdoran o'tkazuvchanlik zonasining tubidan hisoblanadi, Oz o'qi esa o'raning markaziga joylashtirilgan. U holda chegaraviy shartlarning ko'rinishi quyidagicha tanlanadi:

$$j\left(\pm \frac{a}{2}\right) = 0, \quad (2.1.2)$$

a - A qatlam kengligi va interfeys tekisligining koordinatasi: $\pm \frac{a}{2}$. Bunday holda sistema $z \rightarrow -z$ ko'rinishdagi ko'zguli simmetriyaviy akslantirish operatoriga nisbatan simmetriyaviydir. Shu sababdan elektronlarning holat funksiyalari ikki tabiatli: juft va toq to'lqin funksiyalari ko'rinishida bo'lib, mos holda $C \cos(kz)$ va $C \sin(kz)$ ko'rinishda tanlanadi. Bunda $k = (2m_A E_z / \hbar^2)^{1/2}$, S -normirovkalash koeffitsiyenti. Agar yuqorida qayd qilingan chegaraviy shartlar e'tiborga olinsa, u holda kelgusi hisoblashlarda foydali bo'lgan to'lqin vektori va energiyaviy spektr uchun quyidagi munosabatlarga ega bo'lamiz

$$k = \frac{np}{a}, \quad E_z = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{np}{a} \right)^2. \quad (2.1.3)$$

Bunda n juft holatlar uchun toq sonlarni, toq holatlar uchun esa juft sonlarni qabul qiladi¹³.

Shunday qilib energiyaviy spektr

$$E_{enq} = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[\left(\frac{np}{a} \right)^2 + q^2 \right], \quad (2.1.4)$$

ko'rinishda bo'lib, u o'lchamli kvantlashgan zonachalar(zonalar tarmoqlari)dan iborat bo'ladi.

Endi chekli balandlikli potentsial to'siq mavjud bo'lgan holni qaryalik. Dastlab $q = 0$ deb hisoblaymiz. A qatlam chekli balandlikli potentsial to'siq bo'lganida, elektronlarning to'lqin funksiyalari B qatlamda ham chekli qiymatlar qabul qiladi va u

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2}{dz^2} + V \right) j(z) = E_z j(z),$$

Shredinger tenglamasining yechimi hisoblanadi. Bunda V potentsial to'siqning interfeysdagi o'tkazuvchanlik zonasi qirgimlari orasidagi energiyaviy oralikdir. Oddiy zonali yaqinlashishda A va B qatlamlar orasidagi interfeysga nisbatan olingan chegaraviy shartlarni

$$j_A = t_{11} j_B + t_{12} \tilde{j}_B, \quad \tilde{j}_A = t_{21} j_B + t_{22} \tilde{j}_B, \quad (2.1.5)$$

ko'rinishda qayd qilish mumkin; j_A va j_B - A va B tarafidan qaralganda elektron to'lqin funksiyalari, $j_A = l \left(\frac{\partial j}{\partial z} \right)_A$, $j_B = l \frac{m_A}{m_B} \left(\frac{\partial j}{\partial z} \right)_B$, $m_{A,B}$ -elektronlarning A va B qatlamlardagi

¹² A qatlam tashqarisida $j(z)$ funksiyasi nolga aylanadi.

¹³ Kelgusida elektronli va kavakli o'lchamli kvantlashgan holatlar, mos holda, an va bm kabi belgilanadi.



effektiv massalari, l -uzunlik birligidagi ixtiyoriy kattalik bo'lib, t_{ij} matritsaviy elementlarni birliksiz tanlashda kiritilgandir; $\hat{t}$ matritsa unimodulyar matritsadir, ya'ni uning matritsaviy elementlari $t_{11}t_{22} - t_{12}t_{21} = 1$ shartni qanoatlantiradi. A/B strukturada A qatlamdan B qatlamga aniq keskin o'tish masalasi $\hat{t}$ matritsaning ko'rinishini aniqlash imkonini beruvchi silliq egiluvchan funksiya metodi qamroviga kirmaydi. Shuning uchun t_{ij} matritsaviy elementlarning qiymatlarini tanlash postulatlashtiriladi va eksperimentlardan olingan yoki boshqa bir mikroskopik hisoblash metodi bilan miqdoran hisoblangan qiymatlar bilan solishtiriladi. Biroq, ko'pgina hollarda, Bastardning

$$j|_A = j|_B, \quad \frac{1}{m_A} \frac{dj}{dz} \Big|_A = \frac{1}{m_B} \frac{dj}{dz} \Big|_B. \quad (2.1.6)$$

chegaraviy shartlaridan foydalaniladi. Bu munosabat $t_{11} = t_{22} = 1$, $t_{12} = t_{21} = 0$ shart qanoatlantirilganda (2.1.5) chegaraviy shartning xususiy holi bo'lib qoladi.

U holda Shredinger tenglamasining xususiy yechimi

$$\varphi(z) = \begin{cases} C \cos kz & \text{agar } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ D \exp \left[-\kappa \left(|z| - \frac{a}{2} \right) \right] & \text{agar } |z| \geq \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (2.1.7)$$

Bu yerda $\kappa = [2m_B(V - E_z)/\hbar^2]^{1/2}$ bo'lib, o'lchamli kvantlashish holat energiyalari potentsial o'ra balandligidan kichik qiymatli hamda B qatlamdagi to'lqin vektori mavhum: $k_B = i\kappa$ deb hisoblangan.

(2.1.7) munosabatni e'tiborga olganida (2.1.6) tenglamalar sistemasidan

$$C \cos k \frac{a}{2} = D, \quad -\frac{k}{m_A} C \sin k \frac{a}{2} = -\frac{\kappa}{m_B} D, \quad (2.1.8)$$

juft holatlarning energiyaviy spektri

$$\operatorname{tgk} \frac{a}{2} = h \equiv \frac{m_A}{m_B} \frac{\kappa}{k}, \quad (2.1.9)$$

toq holatlarning energiyaviy spektri esa

$$\operatorname{ctgk} \frac{a}{2} = -h \quad (2.1.10)$$

ko'rinishdagi transtsendent tenglama yordamida aniqlanadi. Yuqorida keltirilgan ifodalar noldan farqli qiymatli $\frac{1}{q}$ to'lqin vektorli holatlar uchun ham o'rinlidir. Bunda k va κ kattaliklar sifatida quyidagilar tushuniladi:

$$k = \left(\frac{2m_A E}{\hbar^2} - q^2 \right)^{1/2}, \quad \kappa = \left[\frac{2m_B (V - E)}{\hbar^2} + q^2 \right]^{1/2}. \quad (2.1.11)$$

Ma'lumki, bir o'lchamli simmetriyaviy potentsial o'rada, hech bo'lmasa, bir o'lchamli kvantlashgan holat mavjud bo'ladi. Shu sababdan chekli balandlikli potentsial o'rada elektronlarning energiyaviy spektri σ chekli sonli o'lchamli kvantlashgan zonacha(tarmoq)lari hamda $(E - (\hbar^2 q^2 / 2m_B)) > V$ shartni qanoatlantiruvchi kontinuumdan iborat bo'ladi. A va B qatlamlardagi elektronlar effektiv massalari o'zaro teng bo'lganida $E_{\sigma q}(\frac{1}{q})$ munosabat



parabola ko'rinishida bo'ladi¹⁴. Bunday hol bir jinsli kompozitsiyaviy materiallardan tashkil topgan nanostrukturalarda ham kuzatiladi.

Endi chekli potentsial o'ra modelidan cheksiz balandlikli potentsial o'raga o'tishning chegarasi haqida mulohaza qilaylik. Buning uchun potentsial o'ra balandligi V ni

$$V \gg \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{p}{a} \right)^2 \quad (2.1.12)$$

shartni qanoatlantiradigan darajada katta qiymatli deb hisoblaylik. U holda c_1 asosiy holat uchun κ kattalikni taqriban $\kappa_0 = (2m_A V / \hbar^2)^{1/2}$ bilan almashtirish mumkin hamda k / κ_0 nisbatni kichik qiymatli parametr sifatida qarash mumkin. (2.1.9) ifodani $\text{ctg}(ka/2) = (m_B k / m_A \kappa)$ ko'rinishda yozib, k / κ_0 parametrqa nisbatan nolinchida yaqinlashishda c_1 asosiy holat uchun $ka/2 = p/2$ yoki $k = p/a$ munosabat kelib chiqadi va u $V \rightarrow \infty$ chegaraviy holatga hamda (2.1.3) munosabatdagi $n=1$ holga mos keladi. Agar k ni $p/a - dk$ kabi ifodalasak, u holda birinchi yaqinlashishda

$$dk \frac{a}{2} \approx \frac{m_B}{m_A} \frac{p}{\kappa_0 a} \quad \text{yoki} \quad k \approx \frac{p}{a} \left(1 - \frac{m_B}{m_A} \frac{2}{\kappa_0 a} \right)$$

va

$$E_{e1} \approx \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{p}{a} \right)^2 \left(1 - \frac{m_B}{m_A} \frac{4}{\kappa_0 a} \right) \quad (2.1.13)$$

munosabatga ega bo'lamiz.

2.2. Kvantlashgan iplar va nuqtalar

Kvantlashgan o'radada zarra ikki yo'nalish bo'yicha harakatlana oladi. Shu sababdan kvantlashgan o'rani ikki o'lchamli tok tashuvchilar sistemasi (tizimi) deb qaraladi. Bunda o'lchamli kvantlashish holatlarning davomiyligi chegaralangan bo'ladi. Endi esa elektronli holatlarning kvantlashgan ip va kvantlashgan nuqtalardagi kvantlashishini ko'raylik. Bunday tok tashuvchilar tizimi mos holda bir (sistemaning o'lchami $d=1$) va nol (sistemaning o'lchami $d=0$) o'lchamli deb tushuniladi va ularda tok tashuvchilar bir o'lchamli harakatda bo'ladi yoki umuman harakatlanmaydi.

Cheksiz baland to'siqli to'g'ri burchakli kvantlashgan ip. Bunday holda elektronlarning holat funksiyasi

$$\psi(c) = (1/\sqrt{L}) e^{iqz} j(x, y), \quad j(x, y) = j_{n_x}(x, a_x) j_{n_y}(y, a_y),$$

ko'rinishda bo'ladi, L - ipning uzunligi, $1/\sqrt{L}$ - normirivkalanish koeffitsiyenti, q - tok tashuvchilarning ipning asosiy o'qi bo'ylab yo'nalgan to'lqin vektori,

¹⁴ A va B qatlamlardagi elektronlar effektiv massalari miqdoran unchalik farq qilmaydigan hollarda ham $E_{\alpha\vec{q}}(\vec{r})$ munosabatni parabola ko'rinishda tanlash mumkin.



$$j_n(x, a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{cases} \cos \frac{n x}{a} & n \text{ ning juft qiymatlari uchun,} \\ \sin \frac{n x}{a} & n \text{ ning toq qiymatlari uchun} \end{cases} \quad (2.2.1)$$

ν_x va ν_y tartib raqamli zonachalarning q to'liqin vektorli holatidagi elektronning energiyasi

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[q^2 + \left(\frac{n_x p}{a_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y p}{a_y} \right)^2 \right]. \quad (2.2.2)$$

Ifoda yordamida aniqlanadi.

Cheksiz baland to'siqli a_x, a_y, a_z o'lchamli to'g'ri burchakli parallelipiped shaklidagi kvantlashgan nuqta tabiatini tahlil qilaylik. Bu holda elektronlarning holat funksiyasi va energiyaviy spektri

$$y(c) = j_{n_x}(x, a_x) j_{n_y}(y, a_y) j_{n_z}(z, a_z), \quad E = \frac{\hbar^2 p^2}{2m_A} \sum_{j=x,y,z} \left(\frac{n_j}{a_j} \right)^2 \quad (2.2.3)$$

munosabatlar yordamida aniqlanadi.

Endi chekli balandlikli R radiusli sferaviy kvantlashgan nuqtada elektronning asosiy holat ($q=0$) asosiy holat funksiyasi simmetriyaviy va uning ko'rinishi quyidagicha bo'ladi:

$$y(c) = Cr^{-1} \begin{cases} \sin kr & r \leq R, \\ \sin k R e^{-\kappa(r-R)} & r \geq R, \end{cases} \quad (2.2.4)$$

C-normirovkalanganlik koeffitsiyenti,

$$k = (2m_A E / \hbar^2)^{1/2}, \quad \kappa = [2m_B (V - E) / \hbar^2]^{1/2}. \quad (2.2.5)$$

Bunday kvantlashgan nuqtadagi elektronning energiyaviy spektri

$$1 - kR \cotg kR = \frac{m_A}{m_B} (1 + \kappa R).$$

munosabatni qanoatlantiradi.

Cekli balandlikli tsilindrik kvantlashgan ipda elektronning asosiy holat ($q=0$) funksiyalar $J_0(x)$ va $K_0(x)$ Bessel funksiyalari yordamida ifodalanadi:

$$y(c) = \begin{cases} C J_0(kr) & r \leq R, \\ D K_0(\kappa r) & r \geq R, \end{cases} \quad (2.2.6)$$

bu yerda $D = C J_0(kR) / K_0(\kappa R)$.

Holatlarning energiyaviy zichligi. $d = 3, 2, 1, 0$ o'lchamli fazoda kvazizarralarning E_{nk} energiyaviy spektrini tahlil etaylik, n -diskret qiymatli kvant soni, $\vec{k}$ - d komponentali (tashkil etuvchili) to'liqin vektori¹⁵.

Kelgusida kvantlashgan holatlarning energiyaviy zichligi deyilganda d o'lchamli fazoning birlik hajmiga va birlik energiya oraligiga to'g'ri keluvchi holatlar soni tushuniladi. Dirakning d -funksiyasi yaqinlashishida holatlar zichligini

¹⁵ Nol o'lchamli tiimlarda to'liqin vektori fiikaviy mo'iyatini yo'qotib, kvantsoniga aylanib qoladi. Biroq bu kvant soni kvant mexanikasi fanidagi kvant sonlaridan farqli o'laroq, o'lchamli kvantlashish holatlariga taaluqlidir.



$$g_d(E) = \frac{2}{V_d} \sum_{nk} d(E - E_{nk}), \quad (2, 2.7)$$

ko'rinishda qayd qilish mumkin. Bu munosabatdagi 2 raqami elektronli holatlarning spinga nisbatan ikki karrali ayniganini e'tiborga olganligi uchun yuzaga keladi, V_d -qaralayotgan d o'lchamli fazodagi hajm. Masalan, u uch o'lchamli fazoda geometrik hajm, ikki o'lchamli tok tashuvchilar tizimi uchun esa yuza, bir o'lchamli tok tashuvchilar tizimida qaralayotgan sohaning uzunligi bo'ladi. Masalani soddaroq hal qilish maqsadida E_{nk}^r energiyani $\vec{k}$ to'lqin vektoriga nisbatan qatorga yoyib va kvadratik hadlar bilangina chegaralansak, u holda $E_{nk}^r = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_n}$ ifodani olamiz va unda M_n -massa birligidagi kattalik bo'lib, u m_A va m_B

qiymatlarni qabul qilishi mumkin. Bu qatorni (2.2.7) ifodada e'tiborga olsak, u holda holatlar zichligiga n tartib raqamli tarmog'ining ulushi uchun quyidagi munosabatlarni olamiz

$$g_3(E) = \frac{1}{2p^2} \left(\frac{2M_n}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} q(E - E_n^0), \quad (2, 2.8)$$

$$g_2(E) = \frac{M_n}{p\hbar^2} q(E - E_n^0), \quad (2, 2.9)$$

$$g_1(E) = \frac{1}{p} \left(\frac{2M_n}{\hbar^2 E} \right)^{1/2} q(E - E_n^0), \quad (2, 2.10)$$

$$g_0(E) = 2d(E - E_n^0), \quad (2, 2.11)$$

$q(x)$ - x ning musbat qiymatlarida bir, manfiy qiymatlar sohasida esa nol qiymat qabul qiluvchi zinapoyali funktsiya.



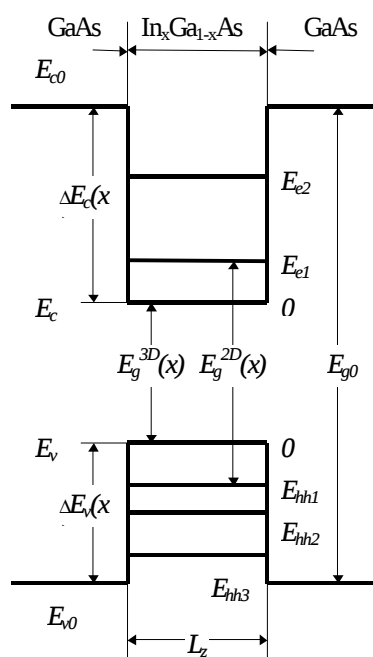
3-bob. O'LCHAMLI KVANTLASHGAN YARIMO'TKAZGICHLI TIZIMLAR

Nanotexnologiyaning ayni paytdagi rivojlanishi geterostrukturali lazerlar, nurlanuvchi diodlar, teragertsli nurlangichlar, qo'yosh batareyalari (xususan kaskadli qo'yosh fotoelementlari), fotoqabul qilgichlar, elektrooptik modulyatorlar, optoelektronli sxemalarning yaratilishiga asos bo'lib, ular mikro(opto)elektronikaning asosini tashkil etadi. Bunday sohalarining kelgusidagi rivoji esa nanofizika-past o'lchamli mikroob'ektlar fizikasining alohida fani (bo'limi) sifatida namoyon bo'lishiga olib keldi.

Shu mazmunda ushbu bob past o'lchamli tok tashuvchilar energiyaviy spektrining nazariy tahliliga bag'ishlangan bo'lib, ikki, bir va nol o'lchamli nanotizimlardagi tok tashuvchilarning fizikaviy tabiati tahlil qilingan. Shuningdek past o'lchamli tizimlarda elektronlarning statistikasi to'g'risida alohida mulohazalar yuritilgan.

3.1. Past o'lchamli tok tashuvchilarning energiyaviy spektri

Ikki o'lchamli elektronli gaz. Masalani oydinlashtirish maqsadida $GaAs - In_xGa_{1-x}As - GaAs$ geterostrukturani ko'raylik. Odatda $In_xGa_{1-x}As$ qattiq aralashmaning qalinligi 1 nm tartibda olinadi.



1-rasm. $GaAs - In_xGa_{1-x}As - GaAs$

geterostrukturaning zonaviy tuzilishi. E_{en} - elektronlarning, E_{lhn} (E_{hnn}) yengil(og'ir) kavaklarning o'lchamli kvantlashgan energiyaviy sathlari. $n = 1, 2, 3, \dots$ energiyaviy sathlarning tarib raqami.

Ma'lumki, $In_xGa_{1-x}As$ qattiq aralashma ta'qiqlangan zonasining kengligi $E \approx 1.43eV$ - dan kichik bo'ladi. Bunda uch qatlamli tizimning chegaraviy sirtlar oralig'ida «tutib qoluvchi» (birinchi jins) geteroo'tish yuzaga keladi: o'tkazuvchanlik zonalar joylashgan sohada elektronlar uchun, valent zonalar joylashgan sohada esa kavaklar uchun o'lchamli kvantlashgan, energiyaviy balandligi cheklangan potentsial o'ra hosil bo'ladi, chunki $In_xGa_{1-x}As$ qatlam qalinligi elektronlar va kavaklarning de-Broyl to'lqin uzunligidan kichikdir. Tabiiyki, bunday hollarda chegaraviy sirtga tik bo'lgan yo'nalishdagi tok tashuvchilar impulsining tashkil etuvchilari o'lchamli kvantlashadi.

Dastlabki yaqinlashishlarda o'lchamli kvantlashgan tizimlarda tok tashuvchilarning E_n energiyaviy spektri va $c_n(z)$ to'lqin funksiyasi egiluvchan funksiyalar hisoblash usuli yordamida aniqlanadi, ya'ni cheksiz chuqur potentsial o'ra uchun

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\nabla^2}{z^2} + E_c(z) \right) c_n(z) = E_n c_n(z),$$

Shredinger tenglamasini yechish talab etiladi; $E_c(z)$ -potentsial to'siqning geometriyaviy fazodagi taqsimotini anglatadi.

Bunda tok tashuvchilar o'raning (x,y) tekisligi bo'ylab de-Broyl to'liqini bo'lib, energiyasi esa kvaziuzliksiz bo'ladi, yani

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_x^2 + k_y^2) + E_n. \quad E_{e1} = \frac{\hbar^2 p^2}{2m_e L_z^2} \cdot k_z = \frac{p}{L_z} n,$$

$E_n = E_{e1} n^2$, L_z -o'raning kengligi¹⁶, $n=1,2,3,\dots$ (1.2) munosabatdan elektron hajmiy kristallardagi kabi tok tashuvchilar o'tkazuvchanlik (valent) zonasining tubi (shipi)da joylashmaydi; elektronlarning minimal energiyasi: $E_{min} = E_c + E_{e1}$, yengil va og'ir kavaklar uchun

esa mos holda $E_{lh1} = \frac{p^2 \hbar^2}{2m_{lh} L_z^2}$, $E_{hh1} = \frac{p^2 \hbar^2}{2m_{hh} L_z^2}$ bo'ladi. O'lchamli kvantlashgan qatlamda ta'qiqlangan zonaning kengligi

$$\Delta E_{g^{2D}}(x, L_z) = \Delta E_{g^{3D}}(x) + E_{e1}(x, L_z) + E_{hh1}(x, L_z) \quad (3.1.3)$$

munosabatdan aniqlanadi; $\Delta E_{g^{3D}}(x)$ -uch o'lchamli (hajmiy) namunadagi ta'qiqlangan zona kengligi va u namunadagi In ning Ga ga nisbatini ulushiga- x kattalikka bog'liqdir.

Umuman olganda $GaAs - In_x Ga_{1-x} As - GaAs$ strukturada potentsial o'raning chuqurligi chekli bo'ladi (odatda $(0,2 \div 0,3) eV$ tartibida)

$$k_z L_z = (n+1)p - 2 \arcsin \frac{k_z \hbar}{\sqrt{2m_e \Delta E_c}}, \quad (3.1.4)$$

transsendent tenglama tok tashuvchilarning energiyaviy spektrini ifodalaydi; bundan uncha chuqur bo'lmagan o'rada bitta o'lchamli kvantlashgan zonachaning bo'lishi mumkinligi kelib chiqadi.

Agar o'lchamli kvantlashgan tizim spin-orbital zonasi yetarlicha qisqa va tok tashuvchilar samaraviy massalari kichik qiymatli bo'lgan anizotropiyaviy yarim o'tkazgichdan olingan, shuningdek tok tashuvchilar energiyaviy spektri noparabola tabiatli bo'lsa, u holda tok tashuvchilarning elektronlarning energiyaviy spektri Keyn modelida

$$ctgkh = 2 \left(q - \frac{1}{q} \right), \quad (3.1.5)$$

tenglama yordamida aniqlanadi; bu yerda

$$q = \left[\frac{E(E_{glh} + E - \Delta E_c)(E_{glh} + E - \Delta E_c + \Delta) \left(E_{glh} + E + \frac{2}{3} \Delta_1 \right)}{\left(E_g + E - \Delta E_c + \frac{2}{3} \Delta \right) (E_{glh} + E) (E_{glh} + E + \Delta_1) (\Delta E_c - E)} \right]^{1/2},$$

¹⁶ Umuman olganda tok tashuvchilar effektiv massalarining bo'yлама tashkil etuvchilari o'lchamli kvantlashishni his qilmasa-da, ko'ndalang tashkil etuvchilarning umumiy ko'rinishi ancha murakkab bo'ladi. Odatda, sifatli tahlillarda, bu holga e'tibor qaratilmaydi.



$$k = \left[\frac{E(E_{glh} + E)(E_{glh} + E + \Delta_1)}{\left(E_{glh} + E + \frac{2}{3}\Delta_1\right)P^2} \right]^{1/2},$$

$$\Delta_1 = \sqrt{9d^2 - 2\Delta d + \Delta^2}.$$

samaraviy massa metodi yordamida aniqlangan og'ir kavaklarning energiyaviy spektri toq holatlar

$$\frac{k}{m_{hh}} \operatorname{tg}\left(\frac{kh}{2}\right) = \frac{k_0}{m_{hh0}} \quad (3.1.6)$$

juft holatlar esa

$$\frac{k}{m_{hh}} \operatorname{ctg}\left(\frac{kh}{2}\right) = \frac{k_0}{m_{hh0}} \quad (3.1.7)$$

tenglamani qanoatlantiradi va ular, zarurat tug'ilganda EHMda hal etiladi. Bu yerda

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}, E = \Delta E_{vhh} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{hh0}}, \quad (3.1.8)$$

Δ -spin-orbital o'zaro ta'sir energiyasi, qolgan kattaliklar ma'lum kattaliklar.

Bir o'lchamli tok tashuvchilar gazi. Umuman olganda kvantlashgan iplar mezoskopik, ya'ni litografiya usulidan boshqa usulda olinmaydi. Shu sababli bir o'lchamli tok tashuvchilar gazi kam tekshirilgan. Bu ma'noda x yo'nalishda olingan kvantlashgan ipdagi tok tashuvchilarning energiyaviy spektri

$$E = \frac{p^2 \hbar^2}{2m_e} \left(\frac{n_1^2}{L_z^2} + \frac{n_2^2}{L_y^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e}, \quad (3.1.9)$$

ifoda yordamida aniqlanadi; L_z, L_y – ip ko'ndalang qirg'imning geometrik o'lchamlari, n_1 va n_2 – bir-biriga bog'liq bo'lmagan holda qiymat qabul qiluvchi natural sonlar.

Nol o'lchamli tok tashuvchilar gazi. O'lchamlari L_x, L_y, L_z bo'lgan prizma shaklidagi potentsial o'ra ichida tok tashuvchilar energiyaviy spektri to'lasicha kvantlashgandir

$$E_n = \frac{p^2 \hbar^2}{2m_e} \left(\frac{n_1^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2}{L_y^2} + \frac{n_3^2}{L_z^2} \right), \quad (3.1.10)$$

n_1, n_2, n_3 – o'zaro bog'liq bo'lmagan natural sonlar. (3.1.10) ko'rinishdagi spektr tizimini kvaziatom sifatida ham qarash mumkin. a radiusli va U_0 energiyaviy balandlikli sferaviy o'lchamli kvantlashgan nuqta ichida $r < a$ masofada yotuvchi m_e samaraviy massali tok tashuvchilarning energiyaviy spektri ctg $ka < 0$ shartni qanoatlantiruvchi hol uchun

$$\sin ka = \pm ka \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e a^2 \Delta E_c}}. \quad (3.1.11)$$



3.2. Past o'lchamli tok tashuvchilarning statistikasi

Hajmiy yarim o'tkazgichlarda elektronlar tizimi. Energiyaviy spektrning kvadratik yaqinlashishida o'tkazuvchanlik zonasi elektronlari uchun holatlar zichligi

$$g_c(E) = \frac{4p}{h^3} (2m_e)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}, \quad (3.2.1)$$

munosabat yordamida aniqlanadi (2a-rasm). Shuningdek fermi-dirak taqsimoti yaqinlashishida elektronlar konsentratsiyasi quyidagi kabi ifodalanadi

$$n = N_c F_{1/2} \left(\frac{F - E_c}{kT} \right), \quad (3.2.2)$$

F – elektronlar uchun kimyoviy potentsial, k – Boltsman doimiysi, $F_{1/2}$ – fermi integrali, $N_c = 2(2pm_e kT)^{3/2}/h^3$. Xususan aynimagan (tuslanmagan) elektronlar gazi uchun

$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right). \quad (3.2.3)$$

aynigan elektronli gaz uchun

$$n = \frac{4}{3\sqrt{p}} N_c \left(\frac{F - E_c}{kT} \right)^{3/2} = \frac{8p}{3h^3} [2m_e (F - E_c)]^{3/2}. \quad (3.2.4)$$

munosabatlar o'rinalidir.

O'lchamli kvantlashgan o'ralarda elektronlar tizimi. Ikki o'lchamli tok tashuvchilar tizimida yuqorida qayd qilingan kattaliklar uchun munosabatlarni olishda uch karrali integral ikki karali va bitta summa bilan almashtiriladi. U holda holatlar zichligi uchun (2b-rasm)

$$g_c^{2D}(E) = \frac{m_e}{h^2 p} \sum_n \Theta(E - E_n), \quad (3.2.5)$$

-teta (pog'onali yoki Xeyisayd) funksiyasi. Oxirgi ikki ifodadan, hajmiy kristalldan farqli o'laroq, $E > E_1$ energiya holatlarining zichligi bitta, faqat bittagina $m^*/(p h^2)$ qiymatga sakrab o'zgarsa, $E < E_1$ shartni qanoatlantiruvchi, holatlar esa mavjud emas.

O'lchamli kvantlashgan tizimlarda elektronli hodisalarning fizikaviy tabiati haroratlar sohasiga bog'liq. Xususan o'ta past haroratlarda erkin elektronlar (kavaklar ham), asosan birinchi energiyaviy sathda to'planadi. $E_2 - E_1 \gg kT$ shart qanoatlantiradigan haroratlar sohasi uchun ikki o'lchamli elektronlar konsentratsiyasi

$$n_s = \int_{E_1}^{\infty} g_c^{2D}(E) f_n(E) dE = N_c^{2D} \ln \left(1 + e^{\frac{F - E_1}{kT}} \right), \quad (3.2.6)$$

$F < E_1$ va $n_{s1} < N_c^{2D}$ ($N_c^{2D} = (m^*/p h^2) k_B T$ – ikki o'lchamli o'tkazuvchanlik zonasi holatlarining samaraviy zichligi) shart bajarilsa, aynimagan elektronlar konsentratsiyasi uchun

$$n_s = N_c^{2D} \exp\left(\frac{F - E_1}{kT}\right). \quad (3.2.7)$$



kuchli aynigan ikki o'lchamli elektronlar uchun ($F < E_1$ va $n_s \ll N_c^{2D}$) quyidagi munosabat o'rinalidir

$$n_s = N_c^{2D} \left(\frac{F - E_1}{kT} \right) = \frac{m_e}{\hbar^2 p} (F - E_1). \quad (3.2.8)$$

O'lchamli kvantlashgan iplarda elektronlar tizimi. Yuqorida keltirilgan mulohazalarga asosan ipning uzunlik birligidagi holatlar zichligi uchun quyidagi ifodani aniqlash mumkin

$$g_c^{1D}(E) = \sum_i \frac{1}{\hbar p} \sqrt{\frac{2m_e}{E - E_i}} \Theta(E - E_i), \quad (3.2.9)$$

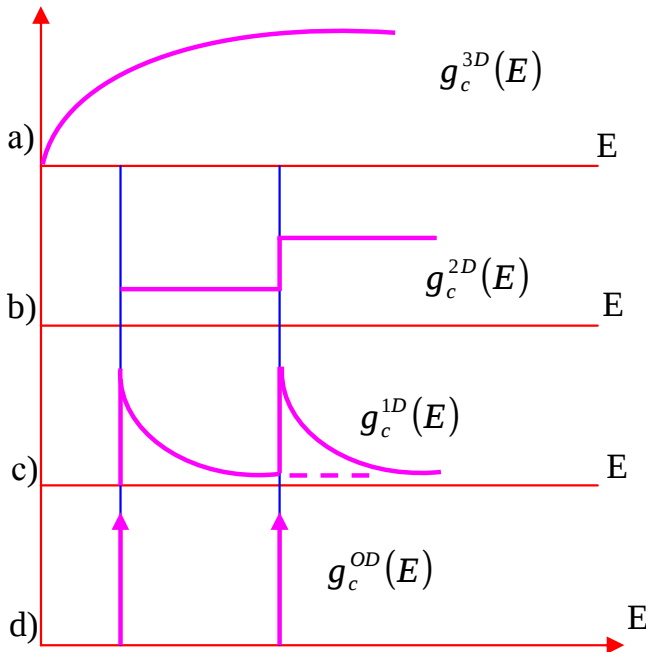
bu yerda i kattalik $E(n_1, n_2)$ energiyaviy spektrdagi n_1 va n_2 kattaliklarning aniq bir kombinatsiyasi yordamida aniqlanadi.

Masalan, o'ta past haroratlar sohasida, asosan, elektronlar eng pastki energiyaviy qavatda joylashganligi uchun $E_2 - E_1 \gg k_B T$ shart bajarilganda elektronlarning chiziqli konsentratsiyasi

$$n_l = \frac{\sqrt{2m_e kT}}{\hbar \sqrt{p}} \exp\left(\frac{F - E_1}{kT}\right), \quad (3.2.10)$$

kuchli aynigan hol uchun esa:

$$n_l = \frac{2\sqrt{2m_e(F - E_1)}}{\hbar p}. \quad (3.2.11)$$



2-rasm. 3(a)-, 2(b)- va 1(c) hamda nol o'lchamli elektronli tizimlarda holatlar zichligining energiyaviy bog'lanishi.

elektronlar tizimidagi kabi aniqlanadi. Odatda, elektronlarning o'zaro kulon ta'siri e'tiborga olinsa, har bir energiyaviy sathda bitta elektronning bo'lishini e'tiborga olsak, fermi-dirak taqsimotining old koeffitsiyenti 2 emas, 1 olinadi, ya'ni sathning spinli aynish koeffitsiyentiga albatta e'tibor qaratish zarur.

(3.2.7, 3.2.10) munosabatlardan ikki va bir o'lchamli elektronlar tok tashuvchilar konsentratsiya-sining temperaturaviy bog'lanishi kuchli aynigan holda to'lasicha fermi energiyasining haroratli bog'lanishi bilan aniqlanadi.

O'lchamli kvantlashgan nuqtalarda elektronlar tizimi. Tabiiyki nol o'lchamli elektronlar holatlari zichligining energiyaviy bog'lanishlari delta (Dirak) funksiyalari bilan aniqlanadi: m – qaralayotgan energiyaviy sathning tartib raqami, spinli aynish e'tiborga olinganda «2» yuzaga keladi. Elektronlar konsentratsiyasi hajmiy yoki ikki o'lchamli



3.3. $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ strukturada ikki o'lchamli elektronlarning fononlarda sochilishi

$GaAs / Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ o'ta panjaraning minizonasidagi elektronlarning ko'ndalang va bo'yлама harakatlanuvchanligi nazariy hisoblangan. Bunda sochilish mexanizmi sifatida tok tashuvchilarning qutbiy optik fononlarda sochilishi tanlangan va $T=300K$ hol qaralgan. Bunday fononlarning uzoqdan ta'sirlashishi potentsialining har xil tebranish moda(tarmoq)larining samaraviy relaksatsiya vaqti va partsial harakatlanuvchanliklariga beradigan ulushlarining nazariy tahlili keltirilgan. Akustik va optik fononlarda tok tashuvchilar impulsi relaksatsiyasi vaqtining o'ta panjaradagi kvantlashgan o'ra kengligiga bog'lanishi tadqiq etilgan. Hisoblashlar boltsman kinetik tenglamasini linearizatsiya (chiziqlashtirish) yordamida olib borilgan. Qutbiy optik fononlarning skalyar potentsiali dielektrik kontinium modelida hisoblangan.

Ma'lumki, $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ tur o'ta panjaralar atomlarining o'zaro bog'lanishi ionli tabiatli yarim o'tkazgichlardan tashkil topgan. Shu sababli xona haroratida asosiy sochilish mexanizmi tok tashuvchilarning uzoqdan ta'sirlashuvchi potentsiali qutbiy optik fonolar (QOF)da sochilishi deb qaraladi.

Kelgusida o'lchamli kvantlashgan o'ra va potentsial to'siqlarning kengligi a va b 5 nm etib tanlangan holda $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ o'ta panjaraning eng pastki minizonasidagi elektronlarning bo'yлама va ko'ndalang harakatlanuvchanligi hisoblangan.

Hisoblash usuli. Elektronlarning o'ta panjara simmetriya o'qiga nisbatan olingan ko'ndalang va bo'yлама harakatlanuvchanliklarini chiziqlashtirilgan boltsman tenglamasi yordamida hisoblaymiz. Tok tashuvchilarning fononlarda noelastik sochilishi e'tiborga olin-sa, u holda umumiy taqsimot funksiyasiga nomuvozanatdagi ulush $g(\vec{k})$

$$g_{//}(\vec{k}) = e \frac{\partial f_0}{\partial e} \sum_i t_i(\vec{k}) E_i v_i(\vec{k}) \quad (3.3.1)$$

ko'rinishda tanlanadi. Bu yerda $f_0(e)$ —muvozanatdagi tok tashuvchilarning fermi-dirak taqsimot funksiyasi, $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ —elektr maydon kuchlanganligi vektori, $\vec{v} = \nabla_{\vec{k}} \frac{e}{\hbar}$ —elektronlarning guruh tezligi,

$$e(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{\Delta}{2}(1 - \cos k_z d) \quad (3.3.2)$$

pastki minizonadagi elektronlarning energiyaviy spektri; $k_{\perp} = \{k_x, k_y\}$ —o'ta panjara simmetriya o'qiga nisbatan tik yo'nalgan to'lqin vektori, $m_{\perp}$ —elektronlarning ko'ndalang samaraviy massasi bo'lib, u kekusida miqdoran tok tashuvchilarning o'lchamli kvantlashgan o'rani hosil qilgan yarim o'tkazgichdagi hajmiy samaraviy massasiga teng deb olingan. d va Δ —o'ta panjaraning davri va minizonasining energiyaviy kengligi, $t_i(\vec{k})$ —analitik ko'rinishi izlanayot-gan funksiya bo'lib, umuman olganda, $\vec{k}$ —to'lqin vektoriga bog'liqdir.

Impuls relaksatsiyasining samaraviy vaqti funksiyasi—chiziqlashtirilgan boltsman tenglamasini miqdoriy yechish bilan hisoblangan. Bu vaqt ikki o'lchamli tizimlar uchun



$$t_{\perp}(e) = t_0(e) \left\{ \sum_{\vec{k}} \left[W_{\vec{k}\vec{k}}^{-} + f_0(e)(W_{\vec{k}\vec{k}^1}^{-} - W_{\vec{k}^1\vec{k}}^{-}) \right] \cdot \frac{f_0^1(e^1) \vec{k}_{\perp} \vec{k}_{\perp}^1}{f_0^1(e) k_{\perp}^2} k_{\perp}(e^1) + 1 \right\}, \quad (3.3.3)$$

$$t_{//}(e) = t_0(e) \left\{ \sum_{\vec{k}} \left[W_{\vec{k}\vec{k}}^{-} + f_0(e)(W_{\vec{k}\vec{k}}^{-} - W_{\vec{k}\vec{k}}^{-}) \right] * \frac{f_0'(e') \sin k_z d}{f_0'(e) \sin k_z d} t_{//}(e') + 1 \right\}, \quad (3.3.4)$$

$t_0^{-1}(e) = \left\{ \sum_{\vec{k}} \left[W_{\vec{k}\vec{k}}^{-} + f_0(e')(W_{\vec{k}\vec{k}}^{-} - W_{\vec{k}\vec{k}}^{-}) \right] \right\}$ -elektronning $\vec{k}$ to'lqin vektorli holatda to'la yashash vaqti,

$$W_{\vec{k}\vec{k}'}^{-} = W_{\vec{k}\vec{k}'}^{\pm} + W_{\vec{k}\vec{k}}^{\pm}, \quad (3.3.5)$$

$$W_{\vec{k}\vec{k}}^{\pm} = w(\vec{q}) \left(N_w + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) d_{\vec{k}, \vec{k} \pm \vec{q}} d(e' - e \pm \hbar w) \quad (3.3.6)$$

-elektronlarning $\hbar w$ energiyali fononlarda sochilish ehtimolligi, N_w -fononlarning boze-eynshteyn taqsimot funksiyasi $t_{\perp}(e) = t_x(e) = t_y(e)$, $t_{//}(e) = t_z(e)$ $e = e(\vec{k}_{\perp}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}}$.

Kvazi ikki o'lchamli yaqinlashishda relaksatsiyaning t_i samaraviy vaqti va t_0 funksiyalar elektronning ko'ndalang harakat energiyalarigagina bog'liq bo'ladi. Elektronlarning qutbiy optik fononlarda sochilishi noelastik tabiatli deb qarasa, u holda $\vec{k}$ to'lqin vektori bo'yicha olib borilgan integraldan so'ng (3.3.3, 3.3.4) tenglama

$$t_i(e) = t_{i0} \{ G_i^+(e) t_i(e + \hbar w) + G_i^-(e) t_i(e - \hbar w) + 1 \} \quad (3.3.7)$$

ko'rinishini oladi,

$$t_{oi}^{-1}(e) = t_i^{-1}(e) + \sum_j t_{ji}^{-1}(e). \quad (3.3.8)$$

Ma'lumki, agar $A^{III}B^V$ kimyoviy birikmali yarim o'tkazgichlar dielektrik muhit sifatida qaralsa, u holda qutbiy optik fononlarning uzoqdan ta'sir potentsial hisobiga sodir bo'ladigan tebranishlar ikki: Q (quided) va I (interfice) tabiatli bo'ladi. Q tabiatli tebranishlar modasi chastota bo'yicha tuslangan (aynigan) bo'lib ikki xil qiymat qabul qiladi. Ularning biri kvantlashgan o'ra hosil qilingan yarim o'tkazgichdagi bo'ylama qutbiy optik fononlarning (w_{La}) chastotasiga teng bo'lsa, ikkinchisi potentsial o'ra namunasidagi bo'ylama qutbiy optik chastotasi (w_{Lb}) ga teng bo'ladi. (w_{La}) chastotali Q tebranishlarning amplitudasi kvantlashgan o'ra sohasida, w_{Lb} -chastotali Q tebranishlar amplitudasi esa potentsial to'siq sohasidan noldan farqli qiymat qabul qiladi. Shuning uchun kvantlashgan o'ra va potentsial to'siqlarda Q tebranishlar tarmoqlarini alohida holda tahlil etish zarur.

I tebranishlar esa to'rt tarmoqli bo'lib, ularning chastotalari miqdoran o'ra va to'siqlar hosil qilingan namunalarning ko'ndalang va bo'ylama chastotalariga tengdir va fononning to'lqin vektoriga nisbatan dispersiya(bog'lanish)ga ega.

Tok tashuvchilar uzoqdan ta'sir potentsialiga ega bo'lgan Q va I tebranish(fonon)larda sochilish ehtimolligi elektronning



$$y_{\vec{k}}(F) = \sqrt{\frac{d}{V}} e^{\vec{k}_1 \vec{r}_1} \sum_n e^{ik_z dn} j(z - dn) \quad (3.3.9)$$

ko'rinishdagi to'lqin funktsilariga nisbatan hisoblangan,

$$j(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{p}{a} z\right), & \text{agar } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ 0 & \text{agar } |z| > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (3.3.10)$$

Bunday yaqinlashishda $w_G = w_{La}$ chastotali barcha kvantlashgan o'radagi kristall panjara-larining simmetriyaviy Q-tebranishlarida elektron sochilish ehtimolligining aniq ko'rinishini topish mumkin:

$$w_G(\vec{q}) = w_G(\vec{q}_\perp) = \frac{1}{8} C_{PO} \frac{pa(4+a^2)(g+3a^2) - 64Ha(q_\perp \frac{a}{2})}{a^3(4+a^2)^2} \quad (3.3.11)$$

$C_{PO} = \frac{e^2 adw_{La}}{p^2 e_0 e_a^* V}$, $a = \frac{aq_\perp}{p}$, a -kvanlashgan o'ra kengligi, $(e^*)^{-1} = e_\infty^{-1} - e_s^{-1}$, B-o'ta panjaraning hajmi. "a"(b) indeks kvantlashgan o'ra potentsial to'siq yasalgan yarim o'tkazgichga tegishli ekanini anglatadi.

I tur tebranishlarda sochilish ehtimolligi quyidagi ifoda yordamida aniqlanadi:

$$w(\vec{q}) = 16C_{PO} \frac{|1+v(\vec{q})|^2 sh\left(\frac{aq_\perp}{2}\right)}{a^3(4+a^2)^2} \frac{w_{La} C_{aL}^2}{w C_a^2} \{sh(aq_\perp +$$

$$+\frac{1}{4} e^{dq_\perp} \frac{r_{mb} C_b^2}{r_{ma} C_a^2} \left| e^{-aq_\perp} \left(1 - \frac{e_a}{e_b}\right) + v(\vec{q}) \left(1 + \frac{e_a}{e_b}\right) \right|^{-1};$$

$$C_i^2 = C_i^2(w) = \frac{e_0 e_\infty (w_{Li}^2 - w_{Ti}^2)}{r_{mi} (w^2 - w_{Ti}^2)^2}$$

$$e_i = e_i(w) = e_{\infty i} \frac{w_{Li} - w^2}{w_{Ti}^2 - w^2}, \quad (3.3.13)$$

$$C_{aL}^2 = C_a^2(w_{La}),$$

$$r_{mi} = \Omega(m_{Ai}^{-1} + m_{Bi}^{-1})$$

$\Omega - A^{III} B^V$ yarim o'tkazgich elementar uyachasining hajmi bo'lib, hisoblashlarda u kvantlashgan o'ra va potentsial to'siq uchun bir xil deb olingan, m_A va m_B -elementar uyachani tashkil qilgan kimyoviy ikki xil atomlarning massalari; w_L va w_T -hajmiy namunalardagi atomlarning bo'ylama va ko'ndalang qutbiy optik tebranishlari chastotalaridir; $v = v(\vec{q})$ -o'lchamsiz kompleks kattalik.

Hajmiy fononlarning spektri elektronlarning sakrab o'tishlari hisobga olinsa $w(\vec{q})$ funksiyani

$$w(\vec{q}) = \frac{a}{pd} C_{PO} \sum_n \frac{\sin^2(px_n)}{x_n^2(1-x_n^2)^2} \frac{1}{a^2 + 4x_n^2} \quad (3.3.14)$$



ko'rinishida qayd qilish mumkin; $x_n = \frac{a}{2p}(q_z + \frac{2p}{d}n)$, $-\frac{N_z}{2} \leq n \leq \frac{N_z}{2}$, N_z -o'ta panjara davrining soni.

Elektronlarning akustik fononlarda izotropiyaviy elastik sochilishi relaksatsiya vaqti

$$t_{\perp}(e) = t_{\parallel}(e) = t = \frac{2}{3} \frac{ac_L \hbar^3}{m_0 D_0^2 k_0 T} \quad (3.3.15)$$

yordamida ifodalanadi. $C_L = C_{11} + \frac{2}{5}(C_{12} + 2C_{44} - C_{11})$ -hajmiy yarim o'tkazgichlar bo'ylama akustik tebranishlari elastiklik modulining o'rtacha qiymatidir; D_0 -o'tkazuvchanlik zonasining chetki (chegaraviy) deformatsiya potentsialining doimiyligi.

Relaksatsiyaning samaraviy vaqti va o'ta panjaradagi ikki o'lchamli elektronlar gazi modelida bo'ylama va ko'ndalang harakatlanuvchanlik

$$m_{\perp} = e \frac{\langle t_{\perp} \rangle}{m_{\perp}}, \quad m_{\parallel} = \frac{e \langle t_{\parallel} \rangle}{\langle m_{\parallel} \rangle} \quad (3.3.16)$$

ifodalar yordamida aniqlanadi; $\langle t_{\perp} \rangle, \langle t_{\parallel} \rangle, \langle m_{\parallel} \rangle$ -mos holda ko'ndalang va bo'ylama relaksatsiya samaraviy vaqti, shuningdek bo'ylama samaraviy massaning energiyaviy funksiyasi orqali o'rtachalashtirilgan qiymatlaridir:

$$\langle t_{\perp} \rangle = \frac{P_c}{n} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right) t_{\perp}(e) e de, \quad \langle t_{\parallel} \rangle = [1 - \exp(-\frac{n}{N_c})]^{-1} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right) t_{\parallel}(e) e de, \quad (3.3.17)$$

$$\left\langle \frac{1}{m_{\parallel}} \right\rangle = \frac{\Delta P_c}{4m_{\parallel} n} [1 - \exp(-\frac{n}{N_c})]; \quad (3.3.18)$$

$r_c = \frac{m_{\perp}}{p d \hbar^2}$ -pastki o'tkazuvchanlik minizonasining ikki o'lchamli holatlar zichligi; $N_e = k_0 T P_c$ -holatlarning samaraviy zichligi, $m_{\parallel} = \frac{2\hbar^2}{\Delta^2 d^2}$ -minizona tubidagi ko'ndalang samaraviy massa.

Aynimagan (tuslanmagan) elektronli gaz uchun ($n \ll N_c$) energiya bo'yicha o'rtachalashtirilgan bo'ylama samaraviy massaning o'rtacha qiymati: $\frac{1}{\langle m_{\parallel} \rangle} = \frac{\Delta}{k_0 T m_{\parallel}}$.



4-bob. YARIMO'TKAZGICHLI NANOSTRUKTURALARDA TOK TASHUVCHILARNING ENERGIYAVIY SPEKTRLARINING HISOBLASH USULLARI

Agar yarim o'tkazgichli qatlamlarning qalinligi elektronlar yoki kavaklarning de-Broyl to'lqin uzunligidan kichik bo'lsa, u holda elektron va kavaklar kvaziimpulsining sirtlarga tik bo'lgan tashkil etuvchisi o'lchamli kvantlashib qoladi. Bunday o'lchamli kvantlashish tok tashuvchilar spektridagi har bir zonaning ikki o'lchamli zonachalarga ajralishiga olib keladi. Bunday hol kuzatilayotgan yarim o'tkazgichli qatlamni «o'lchamli kvantlashgan potentsial o'ra» shaklida qarash mumkin va uni oddiygina *kvantlashgan o'ra* deb nomlaymiz.

Kelgusida dastlab oddiy o'tkazuvchanlik zonasining elektronlari (faqat spinga nisbatangina ikki karrali aynigan hol) uchun o'lchamli kvantlashish xodisasini qaraylik: ularning energiyaviy spektri va o'lchamli kvantlashgan zonachalardagi samaraviy massalari, shuningdek to'lqin funksiyalarining tabiati bilan qiziqamiz.

4. 1. Oddiy zonali yaqinlashish

Kvantlashgan o'ra va o'ta panjaralardagi tok tashuvchilarning energiyaviy spektrini har xil (asosan ikki xil) hisoblash usullari mavjud. Ularning birida kvantlashgan o'ralar yoki o'ta panjarali oddiy (yarim cheksiz) kristallarda qo'llaniladigan hisoblash usullari, masalan, kuchli yoki kuchsiz bog'lanish usuli, psevdopotentsial, ortogonallashtirilgan yassi to'lqin va boshqa usullarda maxsus kristall strukturasi (struktura) sifatida qaraladi. Bu hisoblash usullari, aslida ingichka davrli o'ta panjaralar yoki ingichka, kvantlashgan o'ralar energiyaviy spektrini hisoblashda aslida, rasman, zaruriy hisoblash metodi bo'lib, o'rta(to'siqlar)dagi atomli qatlamlar sonining ortishi bilan hisoblashning murakkablik darajasi orta boradi.

Ikkinchi usul *egiluvchi funksiyalar metodidir*. Bu hisoblash uslubida har bir o'ra (yoki to'siq)dagi elektronlarning samaraviy massalari, yoyinki boshqa kattaliklari hajmiy kristall-dagi kabi qaraladi. Bu esa egiluvchi funksiyalar uchun yozilgan tenglamalarni samaraviy massa usulidagi oddiy tenglamalar deb qarash imkonini beradi. Bu holda tanlangan parametrlarning qiymatlari yoki tajriba natijalaridan olinadi, yoxud hisoblanadi, masalan, EHM yordamida, o'ra yoki to'siqlar o'lchamlarining ortishi bilan egiluvchi funksiyalar usulining aniqlik darajasi ortib boradi. Xususan chiziqli o'lchamlari 8-10 panjara doimiyliklaridan katta bo'lgan o'ralar va to'siqlar uchun qo'llaniladigan bu usul, amalda, juda katta aniqlik bilan natija beradi. Quyida ushbu usulning nozik tomonlari bilan tanishamiz.

Aynimagan zonalar. Agar tok tashuvchilarning spektri izotrop, yoki, agar spektr anizotrop bo'lsag'yu, ammo bo'lim sirtining $\hat{n}$ normal vektori samaraviy massa tenzori bosh o'qlarining birortasi bo'ylab yo'nalgan bo'lsa, u holda

$$\sum_i \left[\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_{ii}} + V(z) - E \right] F(\vec{z}) = 0 \quad (4.1.1)$$

tenglamaning yechimi



$$F(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} y(z), \quad (4.1.2)$$

$V(z)$ - kvantlashgan o'ra (yoki o'ta panjara) potentsialning taqsimoti, $z \parallel \vec{n}$, $\vec{r}_1 = \{x, y\} \perp \vec{n}$.

$V(z)$ potentsial elektronning zona tubidagi, ya'ni $k_{\perp} = 0$ nuqtadagi, energiyasini aniqlaydi. U aralashmalar, harakatlanuvchan zaryadlar yoki tashqi maydonning, shuningdek kristall tarkibi yoki tuzilishning o'zgarishi hisobiga yuzaga keladigan potentsiallarni o'z ichiga oladi. a o'lchamli, to'g'ri burchakli o'ra uchun yozilgan to'lqin funksiyasi o'raning o'rtasidan o'tuvchi tekislikdagi akslantirishga nisbatan ma'lum juftlikka ega bo'ladi va $|z| < a/2$ sohada uni quyidagi ko'rinishda qayd etish mumkin:

$$\begin{aligned} y &= C_1 \cos kz & (\text{juft holat uchun}), \\ y &= C_1 \sin kz & (\text{toq holat uchun}), \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

bu yerda $z=0$ o'raning markaziga mos keladi,

$$k^2 = \frac{2m_{zz}^A}{\hbar^2} (E - E_{\perp}^A), \quad E_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}}. \quad (4.1.4)$$

E energiya o'raning tubi ($V(z)=0$) dan hisoblanadi. a o'lchamli, cheksiz chuqur o'ra, ya'ni

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{agar } -a/2 < -z < a/2, \\ \infty & \text{agar } |z| > a/2 \end{cases} \quad (4.1.5)$$

uchun juft holatlarga

$$k = \frac{p}{a} (2n+1), \quad (4.1.6a)$$

toq holatlar uchun esa $k = \frac{p}{a} 2n$, C_1 koeffitsiyent esa $\sqrt{2/p}$ ga teng.

Chekli balandlikli (V_0) devorlar bilan chegaralangan o'racha uchun, ya'ni

$$V(z) = V_0 \quad (|z| > a/2) \quad (4.1.6b)$$

$Z < -a/2$ sohada: $y = C_2 \exp[l(z + a/2)]$, $Z > a/2$ sohada: $y = C_3 \exp[-l(z - a/2)]$,

Bunda

$$l^2 = \frac{2m_{zz}^B}{\hbar^2} (V_0 - E - E_1^B), \quad E_1^B = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}^B} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}^B} \quad (4.1.7)$$

Bastard shartlarida

$$\begin{aligned} y_A^{\infty} y_A &= m_B^{\infty} y_B, \\ m^{-(1+\infty)} \frac{dy_A}{dz} &= m^{-(1+\infty)} \frac{dy_B}{dz}, \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

bu yerda $m_A = m_{zz}^A$, $m_B = m_{zz}^B$. Energiyaviy sathlarning holatlarini aniqlash imkonini beruvchi transtsendent tenglama

$$\begin{aligned} tq \frac{kd}{2} &= \frac{l}{k} \left(\frac{m_A}{m_B} \right)^{1+2\infty} & \text{-juft holatlar uchun;} \\ ctq \frac{kd}{2} &= \frac{l}{k} \left(\frac{m_A}{m_B} \right)^{1+2\infty} & \text{-toq holatlar uchun,} \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

$d = a + b$ - o'ta panjaraning (yoki kvantlashgan o'raning) davri, b - to'siqning kengligi.



Ma'lumki, to'g'ri burchakli o'ra va to'siqlar tizimidagi elektronlarning energiyaviy spektri Kroning–Penni modeli yordamida aniqlash fanga dastlabki hisoblash usuli sifatida kirib keldi. Bunday davriy strukturadagi qo'shni o'ralardagi holat to'liqin funksiyasi $J(z)$

$$\begin{aligned} J(z) &= C_1 \cos kz + C_2 \sin kz, & 0 < z < a \\ J(z) &= C_3 \cos k(z-d) + C_4 \sin k(z-d) & d < z < d+a \end{aligned} \quad (4.1.10).$$

ko'rinishga ega bo'ladi; qaralayotgan o'ralar o'rtasidagi to'siqda esa-

$$J(z) = C_5 \operatorname{ch} l(z-a) + C_6 \operatorname{sh} l(z-a) \quad d < z < d+b. \quad (4.1.11)$$

Bu yerda k va l koeffitsiyentlar (4.1.4) va (4.1.7) tenglamalar bilan aniqlanadi. (4.1.10) to'liqin funksiyalari (4.1.8) ko'rinishdagi chegaraviy shartlardan tashqari Blox teoremasidan kelib chiqadigan $J(z+d) = J(z)e^{iqd}$ -davriylik shartini ham qanoatlantiradi; bundan $C_3 = C_1 \exp(iqd)$ va $C_4 = C_2 \exp(iqd)$ munosabatlarga ega bo'lamiz. Natijada C_1, C_2, C_5, C_6 noma'lum koeffitsiyentlar ishtirokidagi to'rtta tenglamalar tizimini hosil qilamiz. Bu tenglamalar tizimining aniqlanuvchisini nolga tenglashtirib $\cos qd = F(E, k_x, k_y)$ munosabatga ega bo'lamiz; bunda

$$F = \cos ka \cdot \operatorname{ch} l a + \frac{1}{2} (R - R^{-1}) \sin kash l a, R = \frac{l}{k} \left(\frac{m_A}{m_B} \right)^{1+2\infty}. \quad (4.1.12)$$

Ushbu holdan Kroning-Penni modeliga $l \rightarrow kR$ almashtirish bilan o'tish mumkin.

Energiyaning (4.1.11) tenglikni qanoatlantiruvchi ruxsat etilgan qiymatlar (q-haqiqiy qiymatlariga mos keluvchi) sohasi *minizonalar* deb yuritiladi; energiyaning ta'qiqlangan, yani (4.1.11) tenglikni qanoatlantirmovchi qiymatlar sohasi *q to'liqin vektorining* mavjud qiymatlar sohasiga mos keladi. Juft minizona tubining holati $k_x k_y = 0$ da $F(E_n^0) = 1$ shart bilan, cho'qqilarining holati esa $q = \pm p/d$ $F(E_n^0) = -1$ shart bilan topiladi. Bunda minizonalarining tubi $q = \pm p/d$, cho'qqisi esa $q=0$ nuqtaga mos keladi. Bunda minizonaning impuls fazosidagi egrilik darajasini ifodalovchi kattalik-tok tashuvchilarning samaraviy massalari

$$\begin{aligned} m_{zz} &= -\frac{\hbar^2}{d^2} \left[\frac{\partial F(E)}{\partial E_0} \right], \\ m_{ii} &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{(\partial F / \partial E)_0}{\partial^2 F / \partial k_i^2}. \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

Bu yerda hosilalar $k_x = k_y = 0$ va $E = E_0$ shartlar e'tiborga olinadi ($i = x, y$).

(4.1.12) umumiy ko'rinish ixtiyoriy davriy struktura (panjaralar) uchun o'rinli ekanini isbotlash qiyin emas. $|z| > d/2$ sohani egallangan yakka to'siq $V(z)(V|_{|z| < d/2} = 0)$ ning tiniqligi $t = |t|e^{id}$ ifoda bilan aniqlansa, u holda bunday to'siqlardan tashkil etilgan struktura uchun (4.1.11) ifodadagi F :

$$F = \frac{1}{|t|} [\cos kd \cdot \cos d + \sin kd \sin d]. \quad (4.1.14)$$



Bu holda yakka langan to'siqning tiniqlik ko'effitsiyenti $r = m i (1 - |t|^2)^{1/2} e^{i\delta}$ bo'lib, Kronig-Penni modeli bo'yicha $t = e^{-ik\delta} \left[ch l \epsilon + \frac{i}{2} (R - R^{-1}) sh l \epsilon \right]^{-1}$.

Endi ko'p energiyaviy vohali yarim o'tkazgichlar uchun yuqorida qayd etilgan holni ko'raylik. Agar tok tashuvchilarning energiyaviy spektri ekstremumlari yaqini sohasida anizotrop (fizikaviy tabiati qaralayotgan yo'nalishga bog'liq bo'lgan) ekstremumlari sirtning normaliga nisbatan noekvivalent joylashgan bo'lsa, u holda kvantlashgan o'ra (o'ta panjara) dagi har xil energiyaviy vohalar uchun sathlarning holatlari ham har xil bo'ladi: vohaning normal yo'nalishda eng kichik qiymatli: m_{zz} samaraviy massali sathlar eng pastkisi hisoblanadi. Masalan, kremniy yarim o'tkazgichida izoenergiyaviy sathning bosh o'qi (001) yo'nalishda yoki $\Delta(0,0,k_0)$ va $(0,0,-k_0)$ nuqtalar yo'nalishida; germaniy panjarasida esa – (111) yo'nalishda joylashgan bo'ladi. k_0 to'lqin vektorining ekstremumni aniqlovchi ko'ndalang tashkil etuvchilari kvantlashgan o'ra (yoki o'ta panjara)larda o'z qiymatlarini saqlab qoladi. Masalan, $\vec{n} \parallel z$ o'ta panjarada t_z davr a_0 dan d gacha o'zgaradi, Brilluen minizonasining o'lchamlari esa, mos holda bu yo'nalishda $\pm p/a_0$ dan $\pm p/d$ gacha o'zgaradi. Bunda k_{oz} nuqta minizoning k'_{oz} nuqtasiga o'tadi $k'_{oz} = k_{oz} - n 2p/d, n = k_{oz}/(p/d)$ nisbatning eng katta qiymati. Agar k_{oz} nuqta Brilluen zonasining chegarasida yotsa, ya'ni $k_{oz} = p/a_0$, u holda $d/a = 2n$ bo'lsa $k'_{oz} = 0$, $d/a = (2n+1)$ bo'lsa $k'_{oz} = p/d$ qiymatlar qabul qiladi. Bu esa, agar o'ta panjara juft sonli elementar (oddiy) kataklardan tashkil topsa, k_{oz} nuqta minizonaning markaziga, agar-toq sonli elementar kataklardan tashkil topsa k_{oz} nuqta minizonaning chegarasida yotadi.

Agar tok tashuvchilarning spektri anizotrop va sirtga normal hamda qaralayotgan ekstremum uchun samaraviy massa tenzorlarining bosh o'qlariga nisbatan ixtiyoriy holda yo'nalgan bo'lsa, u holda z o'qi normal ($\vec{n}$) bo'ylab yo'nalgan x, y, z koordinatalar tizimida.

$$H = \sum_{i,j} \frac{\mathbf{h}^2}{2m_{ij}} + V(z) \quad (4.1.15)$$

bo'lib, m_{ij}^{-1} tenzor noldan farqli nodiagonal tashkil etuvchilariga ham ega bo'ladi.

Bunday hol uchun qurilgan Shredinger tenglamasining yechimini (2.1.12) ko'rinishda yozish mumkin, biroq bunda

$$J(z) = \exp \left\{ -i \left(\frac{m_{zz}}{m_{xz}} k_x + \frac{m_{zz}}{m_{yz}} k_y \right) z \right\} (C_1 e^{ikz} + C_2 e^{-ikz}), \quad (4.1.16)$$

energiya esa

$$E = \frac{\mathbf{h}^2 k^2}{2m_{zz}} + E_{\perp}, \quad E_1 = \frac{\mathbf{h}^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\mathbf{h}^2 k_y^2}{2m_{yy}} + \mathbf{h}^2 (m_{xy}^{-1} + 2m_{zz} m_{xz}^{-1} m_{yz}) k_x k_y \quad (4.1.17)$$

ko'rinishda bo'ladi.

$$(4.1.15) \text{ ifodaga asosan tezlik } \hat{V}_z J = \frac{i}{\mathbf{h}} [zH] J = \frac{\mathbf{h}k}{m_{zz}} (C_1 e^{ikz} - C_2 e^{-ikz}). \text{ Agar } J(z) \text{ va}$$

$\hat{V}_z J(z)$ kattaliklar saqlangandagina chegarada tok tashuvchilar oqimining o'zgarmaslik sharti bajariladi. Bu esa $\infty = 0$ va $m_A = m_{zz}^A, m_B = m_{zz}^B$ belgilash kiritilgandagi (4.1.8)



chegaraviy shartga energiyaviy spektr ifodasidagi ($t_{11}^{zz} = t_{22} = 1$) holga mos keladi. Shuningdek m_{xz} va m_{yz} samaraviy massalar chekli chuqurlikli o'ra va to'siqlardagi (yoki $\infty = 0$ bo'lgan o'ta panjaralardagi) tok tashuvchilar uchun bir xil bo'lsa, (4.1.1) yoki (4.1.11), (4.1.12) (4.1.17) munosabatlardagi $E_{\perp}$ ifodasidagi qo'shimcha hadlar hisobga olingan holda) sekulyar tenglama saqlanib qoladi. Agar to'lqin vektorining bittagina $k_{\perp} = 0$ qiymatiga mos keluvchi ikki ekstremumlardagi energiyalar midoran yaqin bo'lsa, u holda kvantli o'ra (yoki o'ta panjara)da bu vohalar holatlarining aralashuvi sodir bo'ladi. Shunga o'xshash aralashuv o'ra va to'siqlardagi ekstremumlarning pastkilari har xil $\vec{k}_0$ nuqtalarga mos kelgan hollarda ham sodir bo'lishi mumkin. Shunga o'xshash hol, masalan $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ o'ta panjaralarda ($x > 0,3$) sodir bo'lishi mumkin, $AlGaAs$ da pastki ekstremum X nuqtalardan bittasida yotadi, $GaAs$ da esa-G nuqtada joylashgan. Bunda X_1 va X_3 ekstremumlarning ajralib energiyaviy kengayishi yetarlicha katta emas va bu ekstremumlarga mos keluvchi eguvchi x_n va x_n funksiyalarning aralashib ketishi energiya minimal bo'lgan nuqta-X nuqtaning siljishiga olib keladi. X nuqta atrofidagi spektr quyidagi tenglamalar yordamida topiladi:

$$\begin{aligned} \left(E_u - \frac{\hbar^2}{2m_{zz}^x} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E \right) x_u - i \frac{\hbar}{m_0} P \frac{d}{dz} x_n &= 0, \\ -i \frac{\hbar}{m_0} P \frac{dx_u}{dz} + \left(E_v - \frac{\hbar^2}{2m_{zz}^x} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E \right) x_v &= 0, \end{aligned} \quad (4.1.18)$$

bu yerda $P = \langle u | \hat{P}_z | v \rangle$, u va v -mos holda X_1 va X_3 nuqtalardagi blox funktsiyalaridir. Hajmiy kristallarda $id x_{u,v} / dz = k x_{u,v}$ va

$$E = \frac{E_u + E_v}{2} \pm \left[\frac{(E_v - E_u)^2}{4} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^2} P^2 \right]^{1/2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{zz}^x}, \quad (4.1.19)$$

X_1 va X_2 zonalardagi funktsiyalar va ularning birinchi tartibli hosilalari (A va B qatlamlar chegarasida) quyidagi munosabatlar yordamida bog'langan

$$x_i^B = \sum_j t_{11}^{ij} x_j^A + t_{12}^{ij} \nabla x_j^A, \quad \nabla x_j^B = \sum_j t_{21}^{ij} x_j^A + t_{22}^{ij} \nabla x_j^A \quad (4.1.20)$$

($i, j = X_1, X_2$). Qaralayotgan masalaning ko'lamini kengaytirish maqsadida quyida dastlab spinli kengayish, so'ngra energiyaviy spektrning neparabolikligini hisobga olishni qarab chiqamiz.

Hajmiy, masalan T_d simmetriyalik, kristallning G nuqtasi atrofida, o'tkazuvchanlik (shuningdek valent) zonasining spinli kengayishi tok tashuvchilar $H(\vec{k})$ samaraviy gamiltonianida $\vec{k}^3$ ga mutanosib hadning e'tiborga olinishi bilan bog'langan; kvantli o'ra (yoki o'ta panjaralar)da esa $-\vec{k}$ ga mutanosib. Samaraviy massa usulida $\langle 001 \rangle$ tizimli kvantli o'ra uchun spinli kengayish «hadi» $H_{k_1} = -b(\hat{d}_x k_x - \hat{d}_y k_y)$, bunda $b = g_c \langle k_z^2, k_z^2 \rangle = \langle J(z) | \hat{k}_z^2 | J(z) \rangle$. $\langle 111 \rangle$ tizimli kvantli o'ra uchun esa

$$H_{k_1} = b \left[\hat{s}^{\frac{1}{2}} \hat{k} \right] \hat{n} \quad (4.1.21)$$



$b = \frac{2}{\sqrt{3}}g_c < k_z^2 >, \hat{n}$ -bo'lim sirti devoriga tik bo'lgan birlik vektori. Umumiy simmetriyaviy mulohazalardan $\langle 001 \rangle$ strukturalarda $V(z)$ potentsial inversiya markaziga ega bo'lmasa, u holda samaraviy gamiltonian $\left[\hat{s} \cdot \hat{k} \right] \hat{n}$ kabi hadga ham ega bo'lishi mumkin. Keyn modelida bunday had asimmetrik, masalan, o'raning o'ng va chap tomonidagi qatlamlarning ta'qiqlangan va spin-orbital kengaygan zonalar kengliklari har xil bo'lgan potentsial o'rali strukturalarda yuzaga kelishi mumkin. Biroq, hisoblashlar ko'rsatadiki, bunday ulushlar (4.1.20) yoki (4.1.21) kabi ulushlarga nisbatan ($GaAs - AlGaAs$) tur o'ralar uchun, hech bo'lmasa, bir necha o'n marta kichik bo'ladi. O'tkazuvchanlik yoki boshqa zonalar sathlarining aralashuviga olib keluvchi keskin chegaralarda samaraviy massa yaqinlashishining aniqlik darajasi sezilarli pasayadi. $\langle 111 \rangle$ strukturalarda, yuqorida qayd etilganidek, simmetrik $V(z)$ potentsialli o'ralarda ham b koeffitsiyentga o'z ulushini beradi, chunki C_{3v} simmetriyaviy guruhda (z) ni $(-z)$ ga almashtiruvchi element yo'qdir. Bunday ulush hosil bo'lishining fizikaviy sababi $\langle 111 \rangle$ strukturalarida o'ra-to'siq tizimidagi qarama-qarshi chegaralari fizikaviy tabiatining har xilligi bo'ladi.

Yuqorida keltirilgan ifodalarno hisoblashshda o'ra va to'siqlardagi zonaning chetidan hisoblangan energiya ta'qiqlangan zona kengligidan kichik deb qabul qilingan. Agar bunday shart bajarilmasa, u holda energiyaviy spektrning noparaboliyaviyligini hisobga olish kerak bo'ladi. Bu hol Keyn modelida sodda yechiladi. O'tkazuvchanlik zonasidagi elektronlar uchun to'liq funksiyalarini (4.1.3), (4.1.6a,b) yoki (4.1.10) ko'rinishda tanlanishi mumkin; bunda $C_i \hat{\alpha}$ va $C_i \hat{b}$ tashkil etuvchili spinorlardir. Cheksiz chuqurlikli o'ra uchun k avvalgidek (4.1.15) tenglama yordamida aniqlanadi, biroq k va E o'rtasida

$$P^2(k^2 + k_{\perp}^2) = E(E + E + E_q)(E + E_q + \Delta)(E + E_q + \frac{2}{3}\Delta)^{-1} \quad (4.1.22)$$

ko'rinishdagi bog'lanish mavjud bo'ladi. Bu yerda ham, xuddi yuqoridagidek, E o'ra o'tkazuvchanlik zonasining tubidan hisoblanadi. Rasman (4.1.22) tenglama (og'ir kavaklar massasi cheksiz hisoblanganda) ham yengil kavaklarning, ham Γ_7^+ yoki Γ_6 valent

zonasining spinli ajralgan sathlar spektrini beradi va u $E - E_q > E > -(E_q + \frac{2}{3}\Delta)$

energiyaviy oralikda olinishi kerak. Biroq og'ir kavaklarning samaraviy massasi chekli olinganda yengil va og'ir kavaklar holatlarining aralashuvini e'tiborga olmaslik mumkin emas.

Chekli chuqurlikli o'ralar (yoki to'g'ri burchakli o'ta panjaralar) uchun spektrning noparabolaviyligini hisobga olishda chegaradagi har xil spinli holatlarning aralashuvini ham e'tiborga olish darkor. O'raning ikki tarafdagi to'siqlar bir xil energiyaviy balandlikka ega bo'lsa, u holda sathlarning holati ushbu tenglama yordamida aniqlanadi

$$2A_1A_2kl \cos ka + (A_2l^2 - A_1k^2) \sin ka - (B_1 - B_2)k_{\perp}^2 \sin kd = 0. \quad (4.1.23)$$

Bu yerda

$$\begin{aligned} A_i &= P_i^2 \left[2(E + E_{qi} - V_i)^{-1} + (E + E_{qi} + \Delta_i - V_i)^{-1} \right], \\ B_i &= P_i^2 \Delta_i (E + E_{qi} - V_i)^{-1} (E + E_{qi} + \Delta_i - V_i)^{-1} \end{aligned} \quad (4.1.24)$$



$i = 1$ -o'raga, $i = 2$ -to'siq uchun taaluqlidir ($V_1=0$ o'ra uchun), k va E lar (4.1.22) ifoda orqali bog'langan, l va E lar esa (4.1.22) ifoda k^2 ni l^2 bilan, E ni $E-V_2$ bilan almashtirib hosil qilingan ifoda bilan bog'langan, V_2 -to'siqning balandligi. Bu yerda shuni ta'kidlash joizki, o'ta panjaraning energiyaviy spektrida neparabolaviy munosabatni hisobga olish hisoblashda analitik yechimga olib kelmaydi; shu sababli bu kabi masalalarni yechishda elektron-hisoblash mashinalari (EHM)ga murojaat etishni taqozo etadi.

4.2. Murakkab zonali yaqinlashish

Ushbu bandda qisqartirilgan (lekin ko'pgina optik, tashish xodisalarini tushuntirishda yetarlicha aniqlik bilan qo'l keluvchi) holda murakkab zonali yarim o'tkazgichlardan hosil qilingan kvantlashgan o'radagi kavaklarning energiyaviy spektri va to'lqin funksiyalar haqidagi asosiy tushunchalari bobida mulohaza yuritamiz.

Agar A_3B_5 (yoki Ge, Si) yarim o'tkazgichlar Γ_8 (Γ_8^+) zonasidagi kavaklarning valent zonasidan o'tkazuvchanlik va spin-ajralgan zonasigacha bo'lgan energiyadan kichik bo'lgan energiyalar bilan chegaralansak, u holda kavaklarning spektrini aniqlash imkonini beruvchi $\|H(\vec{k}) - E\| = 0$ sekulyar tenglamani analitik yechilishi mumkin. $\langle 001 \rangle$ strukturali cheksiz chuqurlikli, to'g'ri burchakli, o'lchamli kvantlashgan o'ralar uchun bunday tenglama dastlab Nedorezov, so'ngra Matulis va Piragas, Dyakonov va Xaetskiy, Merkulov, Perel va Portnoy, Sondjakimar, Andriani va b., Broide va Chamlar tomonidan olingan.

Og'ir va yengil kavaklar o'lchamli kvantlashishining aynigan zonalar uchun g'alayonlar nazariyasining $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -metodi yordamida nahli.. Dastlab g'alayonlar nazariyasining $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -metodi bilan tanishaylik. Aynimagan¹⁷ l tartib raqamli zonadagi elektronlar uchun $\vec{k}_0$ ekstremum nuqtasi atrofida qayd qilingan $H^{(l)}(\vec{K})$ effektiv gamiltonianni $\vec{K}$ to'lqin vektoriga nisbatan qatorga yoyib hamda unga nisbatan ikkinchi tartibli hadlar bilan chegaralansak, u holda

$$H^{(l)}(\vec{K}) = E(\vec{K}) = E_{l\vec{k}_0} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{K} \vec{p}_u + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right) \sum_{n_1=l_1, j_1} \frac{(\vec{K} \vec{p}_{l n_1})(\vec{K} \vec{p}_{n_1 l})}{E_{l\vec{k}_0} - E_{l_1 \vec{k}_0}} \quad (4.2.1)$$

ifodaga ega bo'lamiz; $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$, $\vec{k}$ elektronning to'lqin vektor, n_1 -indeks zonaning indksi $l_1 \neq l$ va l_1 tartib raqamli zonaning ayniganlik darajasi j_1 ni o'z ichiga oladi, $\vec{p}_{n_1 l}$ -zonalararo

matritsaviy element: $\langle n_1, \vec{k}_0 | \vec{p} | l, \vec{k}_0 \rangle$, m_0 -erkin elektronning massasi. (4.2.1) munosabat

yordamida, jumladan, teskari effektiv massa tenzori uchun ifodani ham olish mumkin va u

$$\frac{1}{m_{ab}} = d_{ab} \frac{1}{m_0} + \frac{1}{m_0^2} \sum_{n_1} \frac{p_{l n_1}^a p_{n_1 l}^b + p_{l n_1}^b p_{n_1 l}^a}{E_{l\vec{k}_0} - E_{l_1 \vec{k}_0}} \quad (4.2.2)$$

¹⁷ Oddiy ionali yaqinlashishni aynimagan zonali, murakkab zonali yaqinlashishni esa aynigan zonali yaqinlashish ham yuritiladi.



Agar $\mathbf{k}_0$ nuqtada N karrali aynish mavjud bo'lsa, u holda $H_{jj}^{(l)}$ matritsa $N \times N$ ($j, j' = 1, \dots, N$) o'lchamli matritsa ko'rinishini oladi va uning tashkil etuvchilari aynigan spektrli hol uchun qayd qilingan g'alayonlar nazariyasi yordamida hisoblanadi

$$H_{jj}^{(l)}(\mathbf{K}) = \left(E_{l\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} \right) d_{jj} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{K} \mathbf{p}_{lj, lj'} + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \sum_{n_1=l_1 j_1} \frac{(\mathbf{K} \mathbf{p}_{lj, n_1})(\mathbf{K} \mathbf{p}_{n_1, lj'})}{E_{l\mathbf{k}_0} - E_{l_1 \mathbf{k}_0}}. \quad (4.2.3)$$

Elektronlarning to'lqin funksiyasi $C_j(\mathbf{r})$ eguvchi funktsiyaning $\mathbf{k}_0$ nuqtadagi blox funktsiyasi ko'paytmasining chiziqli kombinatsiyasidan iborat bo'ladi:

$$y(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N C_j(\mathbf{r}) |l, j, \mathbf{k}_0\rangle. \quad (4.2.4)$$

$C_j(\mathbf{r})$ eguvchi funktsiyaning tashkil etuvchilarini N komponentali ustun matritsa ko'rinishida qayd qilish kelgusi hisoblashlarni soddalashtiradi. Oldindan berilgan to'lqin vektorli elektron uchun

$$\hat{C}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) \hat{C}_{\mathbf{K}}, \quad (4.2.5)$$

$$\hat{C}_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} C_{\mathbf{K},1} \\ C_{\mathbf{K},2} \\ \dots \\ C_{\mathbf{K},N} \end{pmatrix}.$$

Valent zonasning spin-orbital kengayishi (tizginlashishi). Endi massalani oydinlashtirish maqsadida bevosita ruxli temirtoshga o'xshash kristall panjarali yarim o'tkazgichlarning zonaviy tuzilishini tekshirishga o'taylik¹⁸. Spinli va norelyativistik yaqinlashishdagi spin-orbital o'zaro ta'sir e'tiborga olinmagan holda *GaAs* tur yarim o'tkazgichlar o'tkazuvchanlik zonasining bo'sag'asi va valent zonasining shipida joylashgan Γ holatlar uchun s va p simmetriyalı holatlar mos keladi. Ularga mos keluvchi orbital yoyinki koordinatalı funksiyalar $S(\mathbf{r}) \equiv S(T_d \text{ nuqtaviy guruhining } \Gamma_1 \text{ tasavvuri})$ va $X, Y, Z(T_d \text{ nuqtaviy guruhining } \Gamma_{15} \text{ tasavvuri})$ ko'rinishda qayd qilinadi. Bu funksiyalarning davri ruxli temirtosh kristallining doimiysiga tengdir. Masalan, $X(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = X(\mathbf{r})$, $Y(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = Y(\mathbf{r})$, $Z(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = Z(\mathbf{r})$, $\mathbf{a}_i (i=1, 2, 3)$ Brave panjarasining asos vektorlari. Spin e'tiborga olinsa, tabiiyki, holat funksiyalar soni ikkiga ortadi: o'tkazuvchanlik zonasida $S \uparrow, S \downarrow$; valent zonasida esa $X \uparrow, Y \uparrow, Z \uparrow$; $X \downarrow, Y \downarrow, Z \downarrow$ bo'lib, valent zonasidagi 6 nafar Γ holatlar Brillyuen zonasining markazida (Γ nuqtada) to'rt karrali va ikki karrali aynigan ikkita alohida alohida holatlarga ajraladi. Ularning to'lqin funksiyalari, mos holda, keltirilmaydigan

¹⁸ Shuni ham qayd qilish o'rinishi, olingan natijalar olmossimon panjarali va ayrim vyurujit strukturalı yarim o'tkaigichlar uchun ham o'rinishi bo'laveradi.



spinli Γ_8 va Γ_7 tasavvurlar bilan shakl almashtiriladi. Kelgusida bunday to'lqin funksiyalarini, oddiygina, Γ_8 va Γ_7 bazislar deb yuritiladi va ular quyidagi ko'rinishda tasvirlanadi

$$\begin{aligned} |\Gamma_8, +3/2\rangle &= -\uparrow \frac{X+iY}{\sqrt{2}}, \\ |\Gamma_8, +1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \uparrow Z - \downarrow \frac{X+iY}{\sqrt{6}}, \\ |\Gamma_8, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \downarrow Z - \uparrow \frac{X+iY}{\sqrt{6}}, \\ |\Gamma_8, -3/2\rangle &= \downarrow \frac{X+iY}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

$$\begin{aligned} |\Gamma_7, +1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [\uparrow Z + \downarrow (X+iY)], \\ |\Gamma_7, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [-\downarrow Z + \uparrow (X-iY)], \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Γ_8 va Γ_7 holatlarni bir-biridan oson farqlash maqsadida bazislar ifodasiga kavaklar effektiv burchakli momentning z o'qiga proyeksiyalari qiymatlari ham ko'rsatildi.

Yuqorida bajarilgan tahlillarni atomlardagi p holatlarga nisbatan solishtirsak, u holda Γ_8 holatlarga $J = 3/2$ qiymatli to'la burchakli momentning $\pm 3/2$, $\pm 1/2$ qiymatli proyeksiyalari mos kelsa, Γ_7 holatlarga esa $\pm 1/2$ qiymatli proyeksiyalari mos keladi.

Lattinjer-Kon gamiltoniani. Γ_8 zonadagi kavaklar uchun (4.2.6) bazisga nisbatan olingan (4.2.24) effektiv gamiltonianning ko'rinishi quyidagicha bo'ladi

$$\mathfrak{H}^{(\Gamma_8)} = \begin{bmatrix} F & II & I & 0 \\ II^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -II \\ 0 & I^* & -II^* & F \end{bmatrix}, \quad (4.2.8)$$

$$\begin{aligned} F &= -\left[(A-B)k_z^2 + \left(A + \frac{B}{2} \right) k_{\perp}^2 \right], \\ G &= -\left[(A+B)k_z^2 + \left(A - \frac{B}{2} \right) k_{\perp}^2 \right], \\ I &= \frac{\sqrt{3}}{2} \left[B(k_x^2 - k_y^2) - 2i \frac{D}{\sqrt{3}} k_x k_y \right], \\ H &= Dk_z (k_x - ik_y) \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

va uchta A, B, D kattaliklar yordamida tavsiflanadi¹⁹. (4.2.8) ko'rinishdagi matritsa Lattinjer-Kon gamiltoniani deb nomlanadi. (4.2.8) gamiltonianida kavaklarning to'lqin vektoriga

¹⁹ Aksariyat yarim o'tkaigichlarda bu kattaliklar elektronlar uchun manfiy qiymatli bo'lib, kavaklar uchun esa musbat qiymatlidir.



nisbatan chiziqli hadlar e'tiborga olinmagan: simmetriya markaziga ega bo'lgan olmossimon yarim o'tkazgichlarda bunday hadlar bo'lmaydi, chunki kristallning simmetriyasi bunga ruxsat bermaydi. Ruxli temirtosh kabi yarim o'tkazgichlarda esa buning aksi: Γ_{15} valent zonasi bilan undan uzoqda joylashgan zonalar bilan spin-orbital aralashuv hisobiga gamiltonianda bunday hadlar bo'lishi mumkin²⁰.

Shunday qilib, kavaklarning energiyaviy spektrini aniqlash imkonini beruvchi dispersiyaviy munosabat

$$\text{Det} \left\| \hat{H} - E d_{jj'} \right\| = \left[(E - F)(E - G) - |H|^2 - |I|^2 \right]^2 = 0$$

aniqlovchini yechish bilan topiladi va u ikki yechimdan iborat bo'ladi

$$\begin{aligned} E_{hh, lh} &= \frac{F + G}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{F - G}{2} \right)^2 + |P|^2 + |I|^2} = \\ &= Ak^2 \pm \sqrt{B^2 k^4 + (D^2 - 3B^2)(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)}. \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

Bu ifodadagi plyus va minus ishoralar, mos holda, og'ir va yengil kavaklarning energiyaviy spektr(tarmoq)lariga to'g'ri keladi. Agar kavaklarning effektiv gamiltonianida to'lqin vektorlariga nisbatan chiziqli hadlar e'tiborga olinmasa, u holda bu tarmoqlarning har biri ikki karrali aynigandir.

Masalaning to'raligini ta'minlash maqsadida

$$\begin{aligned} \hat{C}_{kj1} &= \frac{1}{\sqrt{(E_j - F)(E_j - E_{\bar{j}})}} \begin{bmatrix} H \\ E_j - F \\ 0 \\ I^* \end{bmatrix}, \\ \hat{C}_{kj2} &= \frac{1}{\sqrt{(E_j - F)(E_j - E_{\bar{j}})}} \begin{bmatrix} -I \\ 0 \\ -(E_j - F) \\ H^* \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

Bu munosabatlarda $\bar{j} = lh$ agar $j = hh$, $\bar{j} = hh$ agar $j = lh$.

$k_x = k_y = 0$ hol uchun $[001]$ yo'nalishda o'stirilgan $GaAs / Al_x Ga_{1-x} As$, tur geterostrukturalarda og'ir kavaklar (*heavy-hole* yoki *hh*) va yengil kavaklar (*light-hole* yoki *lh*) energiyalari bir-biriga bog'liq bo'lmagan holda kvantlashadi va ikkita: *lh* va *hh* tartibli seriyalarni hosil qiladi hamda ular, mos holda, burchak momenti proyeksiyalarining $J_z = \pm 3/2$ va $J_z = \pm 1/2$ qiymatlariga mos keladi.

²⁰ Biroq, odatda, bunday hadlarning effektiv gamiltonianga beradigan ulushi juda kichikdir.



(4.2.7) yoki (4.2.11) bilan berilgan gamiltonianli Shredinger tenglamasi yordamida (4.2.12) ifoda bilan berilgan energiyaviy spektrning ikkita tarmog'ini beradi; bu tarmoqlar (sferik yaqinlashishda) samaraviy massasi $m_1 = m_0 / (g_1 + 2\bar{g})$, bo'lgan og'ir kavaklar va samaraviy massasi $m_2 = m_0 / (g_1 - 2\bar{g})$ munosabat bilan aniqlanuvchi yengil kavaklarning erkin harakatlanish sohalariga mos keladi ($\bar{g} = \frac{1}{5}(2g_2 + 3g_3)$).

<001> strukturali kvantlashgan o'ra uchun (4.2.7) yoki (4.2.11) gamiltonianli Shredinger tenglamasining umumiy yechimini (egiluvchi $F_i(z)$ funksiyani)

$$F = \sum_{m=1,2} [C_1^{(m)} F_1(k_m) e^{ik_m z} + C_2^{(m)} F_1(-k_m) e^{-ik_m z} + C_3^{(m)} F_2(k_m) e^{ik_m z} + C_4^{(m)} F_2(-k_m) e^{-ik_m z}] \quad (4.2.12)$$

ko'rinishda topish mumkin. Bu yerda F_1 va F_2 lar (1.2.10) ifodalar bilan aniqlanadi, biroq F, N va J kattaliklar (4.2.9) bilan berilgan bo'lib, <001> kvantlashgan o'ra uchun $H(-k_z) = -H(k_z) = H^*(k_z)$ I esa k_z ga bog'liq bo'lmagan kattalikdir, $k_m = k_{zm}$ ($m=1,2$), k_{zm} - sekulyar tenglamaning yechimi. Cheksiz chuqur o'raning to'siq devorlari ($z = \pm a/2$) da (4.2.1) ifodaning har bir alohida-alohida olingan hadi nolga teng bo'ladi; bundan sakkizta $C_n^{(m)}$ noma'lum koeffitsiyentlar uchun sakkizta bir jinsli tenglamalar tizimi hosil bo'ladi. Bunday tenglamalar tizimining aniqlanuvchisini nolga tenglashtirib

$$\sin k_1 a \cdot \sin k_2 a (|R_1|^2 + \tilde{b}^2 |R_2|^2 - 2\tilde{b} |I|^2) = (1 - \cos k_1 a) 2\tilde{b} |H_1| |H_2|, \quad (4.2.13)$$

sekulyar tenglamani hosil qilamiz; ($R = |I| + i|H|$), $D_m = D(k_{zm})$, $\tilde{b} = (E - F_1)/(E - F_2)$.

Masalaning to'raligini ta'minlash maqsadida Broide, Cham taklif etgan hisoblash usulini qisqacha keltirib o'tish foydalidir. Ular (4.2.7) matritsani qisman diagonalashtiruvchi

$$T = \begin{bmatrix} e^* & 0 & 0 & -e \\ 0 & x^* & -x & 0 \\ 0 & x^* & x & 0 \\ e^* & 0 & 0 & e \end{bmatrix} \quad (4.2.14)$$

matritsadan foydalanib, N gamiltonianni $(+3/2, +1/2, -1/2, -3/2)$ tartibida

$$\tilde{H} = THT^{-1} = \begin{bmatrix} F & R & 0 & 0 \\ R^* & G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G & R \\ 0 & 0 & R^* & F \end{bmatrix} \quad (4.2.15)$$

ko'rinishga keltirib, xususiy funksiyalarni sodda

$$\tilde{F}_1 = \begin{bmatrix} R \\ E - F \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{F}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ E - F \\ \tilde{R} \end{bmatrix} \quad (4.2.16)$$

shaklga keladi; bunda $e = e^{ij} / \sqrt{2}$, $x = e^{in} / \sqrt{2}$, $J = I/|I|$, $h = H/|H|$. (4.2.15) gamiltonianning xususiy funksiyasi



$$\tilde{J}_i = \sum_j T_{ji} j = \sum_j T_{ij}^* J_j \quad (4.2.17)$$

yoki

$$J_{1,4} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| 3/2 > e^{ij} \mathbf{m} \right| - \left| 3/2 > e^{-ij} \right| \right], \quad \tilde{J}_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| 1/2 > e^{ih} \pm \right| - \left| 1/2 > e^{-ih} \right| \right] \quad (4.2.18)$$

ko'rinishda bo'ladi. U holda (4.2.16) tasavvurda (4.2.15)ni

$$F = \sum_{m=1,2} C_1^{(m)} \tilde{F}_e(k_m) e^{ikmz} + C_2^{(m)} \tilde{F}_e(-k_m) e^{-ikmz} \quad (4.2.19a)$$

ko'rinishda qayta yozish mumkin; bunda $\tilde{F}_e(\mathbf{l}=1,2)$ (4.2.16) funksiyalarning biridir. Shunday qilib (4.2.13) tenglama bilan

$$2E = F_1 + G_1 - \left\{ (F_1 - G_1)^2 + 4|R_1|^2 \right\}^{1/2} = F_2 + G_2 + \left\{ (F_2 - G_2)^2 + 4|R_2|^2 \right\}^{1/2} \quad (4.2.19b)$$

tenglamalar birgalikda $\langle 001 \rangle$ strukturali kvantlashgan o'radagi yengil va og'ir kavaklar energiyaviy spektrini aniqlash imkonini beradi. $\mathbf{k}_\perp = 0$ shartda (4.2.13) munosabatdan $k_1 a = p n$ yoki $k_2 a = p n$ va bularga mos holda aynigan valent zonasi uchun ikkita o'zaro bog'lanmagan sathlar to'plamini olamiz:

$$E_2^{(n)} = E_{eh}^{(n)} = -(A + B) p^2 n^2 a^{-2} \quad (4.2.20a)$$

-yengil kavaklar uchun va

$$E_1^{(n)} = E_{hh}^{(n)} = -(A - B) p^2 n^2 a^{-2} \quad (4.2.20b)$$

-og'ir kavaklar uchun energiya qiymatlarini topamiz.

Shunday qilib erkin kavaklarning holatlari ikki o'lchamli $\mathbf{k}_\perp = \{k_x, k_y\}$ to'lqin vektor va zonachalar tartibi n yordamida xarakterlanadi. $\mathbf{k}_\perp = 0$ holda esa strukturada burchakli momentning bosh o'qga tashkil etuvchisi $m = \pm 3/2$ bo'lgan og'ir kavaklar va $m = \pm 1/2$ bo'lgan yengil kavaklarning o'lchamli kvantlashgan holatlari aslo aralashmaydi va ularga $E_{hh}^{(n)}$ va $E_{eh}^{(n)}$ energiyali ikkita o'zaro bog'lanmagan hhn va ehh diskret energiyaviy tizimlar mos keladi.

$\mathbf{k}_\perp \neq 0$ holatda esa, (4.2.13) va (4.2.19a) ifodalardan ko'rinayaptiki, $m = \pm 3/2$ va $m = \pm 1/2$ holat to'lqin funksiyalari o'zaro aralashgan (bog'liq) bo'lib qoladi. Bu hol qaralayotgan masalaning yechimini murakkablashtiradi. (4.2.13)ga asosan yengil va og'ir kavaklarning sathlari uchun mos keluvchi ko'ndalang samaraviy massalarning ko'rinishlari quyidagicha bo'ladi:

$$\frac{m_0}{m_1^{(n)}} = \frac{2}{h^2} \left[\frac{B(A - \frac{1}{2}B) + D^2}{B} + \sin qn \left(\frac{1}{2}A - 3B \right) x \frac{D^2(A^2 - B^2)^{1/2}}{B^2} \frac{(-1)^{n+1} + \cos(pn\phi^{-1})}{pn \sin(pn\phi^{-1})} \right], \quad (4.2.21a)$$

$$\frac{m_0}{m_h^{(n)}} = \frac{2}{h^2} \left[\frac{B(A - \frac{1}{2}B) + D^2}{(-B)} + \sin qn \left(\frac{1}{2}A - 3B \right) x \frac{D^2(A^2 - B^2)^{1/2}}{B^2} \frac{(-1)^{n+1} + \cos pn\phi}{pn \sin pn\phi} \right] \quad (4.2.21b)$$

bu yerda $\phi = [(A - B)/(A + B)]^{1/21}$.

(4.2.26) ifodani yanada qulayroq ko'rinishda



$$2\tilde{b}.tq(k_1 a / 2).ctq(k_2 a / 2) = \left[-\mathbf{D} \pm \sqrt{\mathbf{D}^2 - 1} \right] / |H_1| |H_2| \quad (4.2.22a)$$

ham qayd etish mumkin,

$$\mathbf{D} = 2\tilde{b}|\tilde{1}|^2 - |R_1|^2 - \tilde{b}^2 |R_2|. \quad (4.2.23)$$

Bu ifoda sferik yaqinlashishda quyidagi ko'rinishni oladi

$$\mathbf{D}_0 = B^2 [4k_{\perp}^4 + k_{\perp}^2 (k_1^2 + k_2^2) + k_1^2 k_2^2]^{1/2} \quad (4.2.23a)$$

(4.2.13) ifodadagi ikki ishora $E(k_{\perp})$ bog'lanishning ikki har xil egri chiziqlarga mos keladi (4.2.13) ifodada pastki ishora tanlansa yengil kavaklarning juft tartibli, og'ir kavaklarning esa toq tartibli tarmoqlarini beradi, yuqorigi ishora tanlansa-aksincha.

Yuqorida $\langle 001 \rangle$ strukturali o'ra (yoki o'ta panjara)lar haqida muhokama qilinadi. Endi esa munozarani $\langle 111 \rangle$ strukturali o'ralarga qaratalaylik. Bunda $z \parallel (111), x \parallel (110), y \parallel (112)$ ko'rinishdagi koordinatalar tizimining tanlanishi hisoblashlarni soddalashtiradi. U holda Lattinjer-Kon gamiltonianning ko'rinishi quyidagicha bo'ladi:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ g_1 k^2 + g_3 \left(J_z^2 - \frac{5}{4} \right) (k^2 - 3k_z^2) - \frac{1}{3} (g_2 + 2g_3) (J_+^2 k_-^2 + J_-^2 k_+^2) + \right. \\ \left. + \frac{2}{3} (g_2 - g_3) [(J_+^2 k_+ + J_-^2 k_-) k_z + \right. \\ \left. + \sqrt{2} ([J_z J_+] k_+^2 + [J_z J_-] k_-^2)] - \frac{2\sqrt{2}}{3} (2g_2 + g_3) k_z ([J_z J_-] k_- + [J_z J_+] k_+) \right\}. \quad (4.2.24)$$

Bu ifodada $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y, k_{\pm} = (k_x \pm ik_y) / \sqrt{2}$. Agar gamiltonianni (4.2.10) matritsa ko'rinishida tasvirlasak, u holda matritsaviy elementlarining ko'rinishini quyidagicha qayd etilaadi

$$F = \frac{\hbar^2}{2m} [g_1 k^2 + g_3 (k^2 - 3k_z^2)], \quad G = \frac{\hbar^2}{m} g_1 k^2 - F, \\ H = -\frac{\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{2}{3}} [(2g_2 + g_3) k_z k_- - (g_2 - g_3) k_+^2], \\ I = -\frac{\hbar^2}{m\sqrt{3}} [(g_2 + 2g_3) k_-^2 - 2(g_2 - g_3) k_+ k_z]. \quad (4.2.25)$$

Bu holda ham kavaklarning to'liq funksiyalarini (4.2.13) ko'rinishida tanlash mumkin, biroq ushbu holda I parametr, $\langle 001 \rangle$ strukturadan farqli o'laroq, k_z ga bog'liqdir. Ayni shu holat kavaklarning energiyaviy spektrini ushbu hol uchun Broide va Cham usulini-gamiltonianni qisman diagonallashtirishni qo'llash mazmunsizdir, ya'ni sekulyar tenglamaning tartibini pasaytirish mumkin emas. Agar oxirgi ikki ifodada $g_2 = g_3$ deb hisoblasak yuqorida taklif etilgan shakl almashtirishni amalga oshirish mumkin; kavaklarning spektri $\langle 001 \rangle$ strukturadagi kavaklar spektri ifodalari yordamida aniqlanadi (F, H, I larning farqini unutmagan holda). Hisoblashlarda, boshqacha, ya'ni koordinatalar tizimini $x \parallel \mathbf{r}, y \perp \mathbf{k}_{\perp}$ kabi tanlab (va $k_z=0$ tanlab) F ustun matritsalaridan tashkil topgan tenglamani soddalashtirish mumkin: bunga mos kelgan va $C_{1,2,3,4}^{(m)}$ koeffitsiyentlar uchun yozilgan tenglamalar tizimidan

$$\mathbf{D}_0 \sin k_1 a \cdot \sin k_2 a = \frac{3}{2} B k_{\perp}^2 k_1 k_2 (\cos k_1 a \cdot \cos k_2 a - 1) \quad (4.2.26)$$



sekulyar tenglamani olamiz; $k_1^2 = \frac{2m_{lh}}{\hbar^2} E - k_{\perp}^2$, $k_2^2 = \frac{2m_{hh}}{\hbar^2} E - k_{\perp}^2$, m_{hh}, m_{lh} -mos holda ($m_{hh} = m/(g_1 + 2\bar{g})$, $m_{lh} = m/(g_1 - 2\bar{g})$) og'ir va yengil kavaklarning hajmiy samaraviy massalaridir. Bunday yaqinlashishda $\vec{k}_{\perp} = 0$ shartda energiyaviy sathlarning joylashishi yengil kavaklar uchun

$$E_{lh}^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2m} (g_1 + 2\bar{g}) \frac{p^2 n^2}{a^2} \quad (4.2.27a)$$

og'ir kavaklar uchun

$$E_{hh}^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2m} (g_1 - 2\bar{g}) \frac{p^2 n^2}{a^2} \quad (4.2.27b)$$

ifodalar yordamida topiladi²¹.

Kavaklarning ko'ndalang samaraviy massalari

$$\frac{1}{m_{hh}^{(n)}} = \frac{1}{m_{hh}} + 3\sqrt{m_{lh}^{-1} m_{hh}^{-1}} \frac{(-1)^{n+1} + \cos(pn\sqrt{m_{lh}/m_{hh}})}{pn \sin(pn\sqrt{m_{lh}/m_{hh}})}, \quad (4.2.28a)$$

$$\frac{1}{m_{lh}^{(n)}} = \frac{1}{m_{lh}} + \frac{3}{\sqrt{m_{lh} m_{hh}}} \frac{(-1)^{n+1} + \cos(m_{hh}/m_{lh})}{pn \sin(pn\sqrt{m_{hh}/m_{lh}})}. \quad (4.2.28b)$$

Xususan $m_{lh} \ll m_{hh}$ shart uchun og'ir kavaklar uchun birinchi energiyaviy sathda

$$\frac{1}{m_{hh}^{(1)}} = \frac{1}{2m_{hh}} + \frac{6}{p^2} \frac{1}{m_{lh}}. \quad (4.2.29)$$

Endi qisqacha spinli o'zaro ta'sirga e'tibor nimaga olib kelishini tahlil qilaylik. $\langle 001 \rangle$ va $\langle 111 \rangle$ kvantlashgan o'ra (o'ta panjara)larda (T_d simmetriyaviy guruhli yarim o'tkazgichlar uchun) valent zonasida kavaklarning samaraviy gamiltoniani $\vec{k}_{\perp}$ ga nisbatan chiziqli hadlarni ham o'z ichiga oladi. Yuqorida qaralgan geometriyada samaraviy gamiltonianda k_z ga nisbatan had bo'lmaydi. yengil va og'ir kavaklarga mos keluvchi gamiltonianlarning ko'rinishi (4.2.8) yoki (4.2.15) ko'rinishda bo'ladi (xuddi o'tkazuvchanlik zonasidagi elektronlarnikiga o'xshash).

4.3. Keyn modelida o'lchamli kvantlashish

Minimumlari zonaviy ekstremumdan chetda joylashgan elektronli holatlarining zonalararo siljishi va neparabolalikni e'tiborga olgan holda o'lchamli kvantlashishni qaraylik va shu ma'noda Keyn modellini qo'llaylik. Ma'lumki, Keyn modelida Γ_6 o'tkazuvchanlik zonasi va Γ_7 va Γ_8 valent zonlaridagi elektronli holatlarning $\vec{k}\vec{r}$ aralashuvi aniq e'tiborga olinadi. Bu holda uzoqda joylashgan zonalarining o'zaro ta'siri e'tiborga olinmaydi va elektronlarning to'liqin funksiyasini $c_s R_j(\vec{r})$ Blox funksiyalari bo'yicha qatorga yoyamiz. Bu yerda

²¹ Chekli balandlikka ega bo'lgan potentsial to'siqli o'ra uchun shu xusus hisoblashlar juda murakkab. Bunday masalalar EHM yordamida hal etiladi, shu sabab bu yerda to'xtalib o'tmaymiz.



$c_s (s = \pm 1/2)$ - spin ustunlaridir ($\downarrow$ va $\uparrow$), $R_j(\mathbf{r}) - s(\mathbf{r}), X(\mathbf{r}), Y(\mathbf{r}), Z(\mathbf{r})$ ko'rinishdagi koordinatalar funktsiyalari. Sakkiz egiluvchi funktsiyalarni $s(\mathbf{r})\uparrow$ va $s(\mathbf{r})\downarrow$ Blox funktsiyalarining $u_{1/2}(\mathbf{r})$ va $u_{-1/2}(\mathbf{r})$ lardan tashkil topgan $u(\mathbf{r})$ spinorlari va $X\uparrow, X\downarrow, Y\uparrow, Y\downarrow, Z\uparrow, Z\downarrow$ Blox funktsiyalarining $V_{x,1/2}, V_{x,-1/2}; V_{y,1/2}, V_{y,-1/2}; V_{z,1/2}, V_{z,-1/2}$ komponentlaridan tashkil topgan $V(\mathbf{r}) = (V_x, V_y, V_z)$ vektor spinorlari ko'rinishida tasvirlanadi.

Shredinger tenglamasining $\hat{k}\hat{p}$ hadli $\hat{H}(\mathbf{k})$ gamiltonianini (8×8) matritsa ko'rinishda tasvirlash mumkin

$$Eu = -iP\hat{k}V, \quad (4.3.1)$$

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right)V = iP\hat{k}u + i\frac{\Delta}{3}(s \times V).$$

Bu ifodada E -elektronning Γ_6 o'tkazuvchanlik zonasi tubidan hisoblangan energiyasi, E_g - ta'qiqlangan energiya kengligi, Δ -valent zonasining spin-orbital o'zaro ta'sir energiyasi, $\hat{k} = -i\nabla, P = i(\hbar/m_0)\langle S|\hat{p}_z|Z\rangle$. u va V kattaliklarga nisbatan qayd etilgan tenglamalar sistemasini qayd qilaylik: u kattalikka nisbatan

$$\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m_c(E)}u = Eu \quad (4.3.2)$$

V kattalikka nisbatan esa

$$V = \frac{1}{P} \frac{\hbar^2}{2m_c(E)} \nabla u - i \frac{1}{P} \frac{\hbar^2}{4m_0} [g(E) - g_0] (s \times \nabla) u. \quad (4.3.3)$$

Bu yerda m_0 va g_0 -erkin elektronlarning massasi va Lande faktori ($g_0 \approx 2$)²²,

$$\frac{1}{m_c(E)} = \frac{2}{3} \frac{P^2}{\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g + E} + \frac{1}{E_g + E + \Delta} \right) \quad (4.3.4)$$

$$g(E) = g_0 - \frac{4}{3} \frac{m_0 P^2}{\hbar^2} \frac{\Delta}{(E_g + E)(E_g + E + \Delta)}.$$

Geterostrukturalarning bir jinsli sohalarida elektronli holatlar (4.3.2) tenglamaning umumiy yechimini topish bilan aniqlanadi, bu yechimlar aniq bir chegaraviy shartlarga ko'ra chegara sirtlarida "tikiladi". Keyin modelida chegaraviy shart sifatida u spinor va $P\hat{V}(\mathbf{r})$ vektorning tashkil etuvchilarining geterochegaraga nisbatan normal yo'nalishdagi uzluksizligi bilan aniqlanadi.

Vaqt inversiyasining simmetriyasiga ta'sir qiladigan tashqi ta'sir mavjud bo'lmaganida $u(\mathbf{r})$ spinorli funktsiyani quyidagicha qayd qilish mumkin.

²² Shuni qayd qilish o'rinaliki, $\frac{1}{m_c(0)}$ va $g(0) - g_0$ farq valent zonasining o'tkazuvchanlik zonasidagi elektronlar teskari effektiv massasi va g faktoriga $\hat{k}\hat{p}$ g'alayonlar nazariyasining ikkinchi tartibli yaqinlashishda hisoblangan ulushini anglatadi.



$$u(r) = [f(r) + i s_a h_a(r)] c_s. \quad (4.3.5)$$

Bu yerda c_s -spin ustunlari ($\downarrow$ va $\uparrow$), $f(\vec{r})$, $h_a(\vec{r})$ haqiqiy funksiyalardir. Kvantlashgan nuqta va ipning simmetriyasi bu funksiyalarning ko'rinishlariga o'z ta'sirini ko'rsatadi. Xususan D_{2d} (to'g'ri burchakli parallelepiped yoki ellipsoidning simmetriyasi) simmetriyali kvantlashgan nuqtada elektronning c_1 asosiy holati uchun: $f(r) = f(x^2, y^2, z^2)$, $h_x(r) = yz M_x(x^2, y^2, z^2)$, $h_y(r) = zx M_y(x^2, y^2, z^2)$, $h_z(r) = xy M_z(x^2, y^2, z^2)$ munosabatlar o'rinalidir; bu yerda $M_a - x^2, y^2, z^2$ kattaliklarning ixtiyoriy funksiyalaridir.

4.4. Ko'chirish matritsasi metodi. O'ta panjaralarda kvazizarralar

Elektronlar uchun effektiv massa metodi, fononlar uchun uzluksiz muhit yaqinlashishi va butun muhit elektrodinamikasi yarim o'tkazgichli o'ta panjaralarda kvazizarralarning harakatini tushuntira oladi. Kengligi a va b bo'lgan A va B qatlamlarning muntazam takrorlanishidan yuzaga kelgan cheklanmagan o'ta panjarani qaraylik. Undagi kvazizarralarning holatlari $j(z) \exp(-i\omega t)$ ko'rinishda tanlangan umumlashgan egiluvchi funksiya orqali ifodalanadi. Bunda $j(z)$ A qatlamda

$$j(z) = F_+ e^{ik_A z} + F_- e^{-ik_A z},$$

B qatlamda esa

$$j(z) = G_+ e^{ik_B z} + G_- e^{-ik_B z},$$

ko'rinishga ega bo'ladi. $F_{\pm}$ va $G_{\pm}$ koeffitsiyentlar qatlamning tartib raqamiga bog'liqdir.

Geterochegaralarda $j(z)$ funksiya uchun chegaraviy shartlar

$$j|_A = j|_B, C_A \frac{dj}{dz}|_A = C_B \frac{dj}{dz}|_B. \quad (4.4.1)$$

Elektronlar, fotonlar va fononlar uchun $j(z)$ funksiyalar hamda $C_{A,B}$ koeffitsiyentlarning ma'nolari va k_A, k_B to'lqin vektorlar va ω chastotaning o'zaro bog'liqligi o'ta panjarada umumlashgan kvazizarra uchun dispersiyaviy tenglamalarni keltirib chiqargandan so'ng aniq bo'ladi. $j(z)$ funksiya va uning hosilasini ikki komponentali ustun matritsa ko'rinishida tasvirlaylik

$$\hat{j}(z) = \begin{pmatrix} j \\ \dot{j} \end{pmatrix}, \quad \dot{j}_j \equiv \frac{C_j}{C_A} \frac{1}{k_A} \frac{dj}{dz}. \quad (4.4.2)$$

(z_0, z) qatlam orqali ko'chirish matritsasi deb z va z_0 nuqtalarda (4.4.2) ustunlarni bog'lab turuvchi (2×2) matritsa tushuniladi:

$$\hat{j}(z) = \hat{t}(z, z_0) \hat{j}(z_0).$$

z va z_0 nuqtalar namunada yotgan holda bir jinsli qatlam orqali ko'chirish matritsasi²³ quyidagi ko'rinishga keladi

²³ Shuni qayd qilish o'rinaliki, ko'chirish matritsasi unimodulyardir: $\text{Det } \hat{t} = 1$.



$$\hat{t}(z, z_0) = \begin{bmatrix} \cos kl & \frac{1}{N} \sin kl \\ -N \sin kl & \cos kl \end{bmatrix}. \quad (4.4.3)$$

Bu yerda $l = z - z_0$, A qatlam uchun $\bar{N} = 1$, B qatlam uchun esa $\bar{N} = (C_B k_B) / (C_A k_A) \equiv N$. Bu matritsani keltirib chiqarishda $\frac{\partial j}{\partial z}$ hosila uchun

$$ik_A (F_+ e^{ik_A z} - F_- e^{-ik_A z}) \text{ yoki } ik_B (G_+ e^{ik_B z} - G_- e^{-ik_B z}).$$

munosabat e'tiborga olingan.

$k_B = i\alpha$ shartda va B qatlam sohasida ko'chirish uchun

$$\hat{t}(z, z_0) = \begin{bmatrix} ch\alpha l & \frac{1}{h} sh\alpha l \\ hsh\alpha h & ch\alpha h \end{bmatrix} \quad (4.4.4)$$

munosabat o'rinlidir, bunda $h = (C_B k_B) / (C_A k_A)$.

Blox teoremasiga ko'ra xususiy yechimlarni

$$\hat{j}(d) = \hat{t}_A \hat{t}_B \hat{j}(0) \equiv \hat{T} \hat{j}(0) = e^{iKd} \hat{j}(0),$$

ko'rinishda izlash mumkin, bu holda $d = a + b$ -o'ta panjaraning davri, K - o'ta panjaraning o'qi z bo'ylab tarqalayotgan to'lqinning to'lqin vektoridir.

Kelgusi maqsad K va ω kattaliklar o'rtasidagi munosabatni-dispersiyani aniqlashdir. Bunday tengshlamani dastlab $\hat{T}$ matritsa yaqinlashishida qayd qilamiz:

$$\text{Det} \begin{bmatrix} T_{11} - e^{iKd} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - e^{iKd} \end{bmatrix} = 0.$$

$\hat{T}$ matrisaning unimodulyar ekaniga e'tibor qaratsak,

$$\cos Kd = \frac{T_{11} + T_{22}}{2} \quad (4.4.5)$$

tenglamaga ega bo'lamiz. To'g'ridan to'g'ri ko'paytirib, quyidagi matritsaga ega bo'lamiz

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \hat{t}_A \hat{t}_B = \begin{bmatrix} \cos k_A a & \sin k_A a \\ -\sin k_A a & \cos k_A a \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos k_B b & \frac{1}{N} \sin k_B b \\ -N \sin k_B b & \cos k_B b \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \cos k_A a \cos k_B b - N \sin k_A a \sin k_B b & \dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots & \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{N} \sin k_A a \sin k_B b \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Bu matritsalaridan T_{11} , T_{22} matritsaviy elementlar zarurligidan nodiagonal elementlar hisoblanmasdan nuqtalar orqali ifodalangan. U holda

$$\cos Kd = \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{2} \left(N + \frac{1}{N} \right) \sin k_A a \sin k_B b. \quad (4.4.6)$$

ko'rinishda ifodalangan dispersiya tenglamasini olamiz. Endi aniq masalalarni hal qilaylik.



4.5. O'lchamli kvantlashgan elektronlar

Bunday holda elektron (yoki kavak)ning $j(z)$ -eguvchi to'lqin funksiya, $w = E/\hbar$ va (4.5.6) chegaraviy shartlarni qo'llashda (4.5.38)dagi koeffitsiyent sifatida teskari effektiv massa keladi

$$C_A = \frac{1}{m_A}, \quad C_B = \frac{1}{m_B}, \quad N = \frac{m_A}{m_B} \frac{k_B}{k_A}.$$

To'siqning V energiyaviy balandligidan kichik E energiyali holatlar uchun k_A, k_B to'lqin vektorlarining o'rniga $\vec{k}$ va $i\vec{x}$ to'lqin vektorlari bilan almashtirish va dispersiya tenglamasini

$$\cos Kd = \cos(ka) \operatorname{ch}(\kappa b) + \frac{1}{2} \left(h - \frac{1}{h} \right) \sin(ka) \operatorname{sh}(\kappa b), \quad (4.5.1)$$

shaklda qayd qilish zarur. h kattalik (4.5.9) munosabatda kiritilgan edi.

Keltirilgan zona sxemasida K ning qiymati $\left[-\frac{p}{d}, +\frac{p}{d} \right]$ oraligida o'zgaradi. $\vec{q}$ ning aniq tanlangan qiymatlariga, masalan, $\vec{q} = 0$ qiymatiga, mos kelgan $E(\vec{q}, K)$ energiyaviy spektr o'zaro ketma-ket almashinib keladigan ruxsat etilgan va ta'qiqlangan minizonalardan iborat bo'ladi. Keng potentsial to'siqli o'ralarda $E \ll V$ shartni qanoatlantiruvchi ruxsat etilgan minizonalar tor tirqishli bo'lib, ular elektronlarning o'lchamli kvantlashgan sathlari yaqinida joylashgan bo'ladi. b potentsial to'siqning kengligi toraygan sari ruxsat etilgan minizonalar energiyaviy kengligi orta, ta'qiqlangan minizonalar esa toraya boradi. $b \rightarrow 0$ shartda energiyaviy spektrining minizonali tabiati yo'qola borib, A hajmiy yarim o'tkazgich o'tkazuvchanlik zonasining parabolaviy energiyaviy spektriga aylanadi.

K ning kichik qiymatlar sohasini tahlil qilish maqsadida

$$1 - \cos Kd = \frac{1}{2} \sin(ka) \operatorname{sh}(\kappa b) f_1 f_2 \equiv F, \quad (4.5.2)$$

$$f_1 = \operatorname{tg}\left(k \frac{a}{2}\right) - h \operatorname{th}\left(\kappa \frac{b}{2}\right), \quad f_2 = \frac{1}{h} \operatorname{ctg}\left(k \frac{a}{2}\right) + \operatorname{cth}\left(\kappa \frac{b}{2}\right)$$

munosabatlardan foydlanamiz. $f_1 = 0$, $f_2 = 0$ hamda $b \rightarrow \infty$ shartlarda bu tenglama avval olingan natijalarga aylanadi. Masalan, $Kd \ll p$ shart o'rinli bo'lsa, u holda

$$E \approx E_{en} + \frac{d^2}{2F'} K^2,$$

Bu yerda n ruxsat etilgan minizonaning tartib raqami, $E_{en} - K = 0$ hol uchun qayd etilgan

$$\text{energiya, } F' = \left. \frac{\partial F(E)}{\partial E} \right|_{E=E_{en}}.$$

O'ta panjaraning z o'qi bo'ylab harakatlanayotgan elekt ronning effektiv massasi va $F(E)$ o'rtasida $M_{zz} = F' \hbar^2 / d^2$ munosabat mavjuddir. $\exp(\kappa b) \gg 1$ shartni qanoatlan-



tiradigan keng potentsial to'siqlarda ruxsat etilgan minizonalar tor energiyaviy tirqishli va $E(K)$ bog'lanish $E(K) \approx E_{en} + (1/F')(1 - \cos Kd)$ ko'rinishni oladi.



ADABIYOTLAR

1. Поверхностные свойства твердых тел Под ред. М.Грина. М.:Мир, 1972. –432 с.
2. Новое исследование поверхности твердого тела. М.: Мир. 1977. 372 с.
3. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки: Пер. с англ.-М.: Мир,-1989.-240 с.
4. Ивченко Е.Л., Расулов Р.Я. Симметрия и реальная зонная структура полупроводников. Ташкент. “Фан”. 1989. -126. С
5. Ивченко Е.Л., Расулов Р. Я. Оптические явления в полупроводников. Фергана. Лаборатория оперативной печати при ФерГУ. 1989. -94 с.
6. Расулов Р.Я., Холитдинов Х. Гетеротизилмали яримутказгичларда фотогальваник ходисалар. Фар.ДУ. 1992.
7. Недорезов С.С. // ФТТ. 1970. Т.12. № 8. С.2269-2276.
8. Матулис А., Пирагас К. // ФТП. 1975. Т.9. № 1 С.2202-2204.
9. Дьяконов М.И., Хаецкий А.В. // ЖЭТФ. 1982. Т.82. № 5. С.1584-1590.
10. Меркулов И.А., Перель В.И., Портной М.Е. // ЖЭТФ. 199 Т.99. № 4. С.1202-1214.
11. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. - М.: “Наука”, 1972. - 584с.
12. Ивченко Е.Л., Расулов Р.Я. Симметрия и реальная зонная структура полупроводников. Ташкент. “Фан”. 1989. -126 с.
13. Bastard G. Wave mechanics applied to semiconductors heterostructures, Le Ulis Ed. De Phys., 1988, 360 p.
14. Pikus G., Ivchenko E. Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena, Springer Series in Solid-State Sciences, vol. 110., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1995; second edition 1997.
15. Mitin V.V., Kochelap V.A., Stoscio M.A. Quantum Heterostructures, Microelectronics and Optoelectronics. Cambridge University Press, 1999.
16. Glaude W., Borge V. Quantum semiconductors structures (Fundamentals and Applications), Ac.Press San Diego, N.Y., Boston, London, Sidney, Tokyo, Toronto. 1993.

