

**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY VA O‘RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI**

NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI

Qo‘lyozma huquqida

UDK 621.384.2+3

MAHMUDOV AZAMAT SATTOROVICHNING

« Yarimo‘tkazgichlar asosidagi nanotuzilmalarda ba’zi
kvazizarralarni xossalari o‘rganish. » **mavzusidagi**

**Magistr ilmiy darajasini olish uchun
yozilgan**

D I S S E R T A T S I Y A

Ilmiy rahbar: **f.m.f.n P. Baymatov**

Namangan - 2016

Mundarija

Kirish.....	3
I-Bob Fazoviy kvantlanishni kvanto-mexanik asoslari	
I.1 . SHredingerning statsionar tenglamasi.....	12
I.2. Bir o‘lchovli cheksiz chuqur potensial o‘ra.....	13
I.3 . Uch o‘lchovli cheksiz chuqur potensial o‘ra.....	17
I.4. Bir o‘lchovli chekli potensial o‘ra.....	19
I.5. Uch o‘lchovli chekli potensial o‘ra	24
I.6. Bir o‘lchovli garmonik ossillyator	26
I.7. Uch o‘lchovli garmonik ossillyator.....	28
II-Bob Markaziy maydondagi xarakat	
II.1 Markaziy maydondagi xarakat xususiyatlari.....	28
II.2. Vodorod atomi. Radial tenglamani echimi.....	33
II.3. CHeksiz chuqur sferik o‘ra.....	35
II.4. CHekli sferik o‘ra.....	38
II.5. Simmetrik va antisimmetrik to‘lqin funksiyalar.....	40
II.6. Geliysimon atomlarning asosiy xolati.....	44
III-Bob Fazoviy kvantlanish prinsipi. Fazoviy kvantlanuvchi tuzilmalar	
III.1. Ikki o‘lchovli elektron gazli tuzilmalar. Kvantlovchi o‘ralar.....	46
III.2. Bir o‘lchovli elektron gazli tuzilmalar. Kvantlovchi iplar.....	47
III.3. Nol o‘lchovli elektron gazli tuzilmalar. Kvantlovchi nuqtalar.....	51
IV-Bob Nanotuzilmalarda tok tashuvchilar statistikasi va xolatlar zichligi	
IV.1. Xolatlar zichligi.....	55
V.2. Nanotuzilmalarda adiabatik polyaronlar.....	63
Xulosalar.....	73
Adabiyotlar.....	74

KIRISH

O'tgan 2015 yil bizning bosh maqsadimiz bo'lmish asosiy vazifa – odamlarimizning munosib hayot darajasi va sifatini tahminlash va rivojlangan demokratik davlatlar qatoridan o'rin egallash bo'yicha avvalo muhim islohotlarni amalga oshirish yo'lida katta qadam bo'ldi, deb aytishga to'liq asoslarimiz bor.

Bu borada gap, avvalo, har tomonlama puxta o'ylangan, uzoqni ko'zlaydigan keng ko'lamli Dasturni hayotga joriy etish haqida bormoqda. Ushbu dastur mohiyat ehtibori bilan chuqur tarkibiy o'zgarishlarni amalga oshirish, kichik biznes va xususiy tadbirkorlik manfaatlarini ishonchli himoya qilish, eng muhimi, Konstitutsiyamizda ko'zda tutilganidek, xususiy mulkning qonuniy, me'yoriy-huquqiy va amaliy jihatdan ustuvor rolini ta'minlash, O'zbekiston iqtisodiyotida davlat ishtirokini bosqichma-bosqich kamaytirishga qaratilgani sizlarga yaxshi ma'lum, albatta.

Ta'kidlash joizki, taraqqiyotimizning hozirgi bosqichida faqat uglevodorod homashyosi, qimmatbaho va rangli metallar, uran homashyosini qazib oladigan va qayta ishlaydigan korxonalarni, shuningdek, tabiiy monopoliyalarning strategik infratuzilma tarmoqlarini – temir va avtomobil yo'llari, aviatashuvlar, elektr energiya ishlab chiqarish, elektr va kommunal tarmoqlarini to'g'ridan-to'g'ri davlat boshqaruvida saqlab qolish maqsadga muvofiq, deb topildi.

2015 yilda korporativ boshqaruv tizimidagi prinsip va yondashuvlarni tubdan o'zgartirishimiz uning haqiqiy bozor xususiyatlariga ega bo'lishini ta'minlash va konservativ qarashlardan xalos bo'lishida katta hissa bo'ldi.

Barcha aksiyadorlik jamiyatlarining faoliyati to'liq inventarizatsiyadan o'tkazildi, natijada 462 ta jamiyatni yoki ularning 43 foizini tugatish yoki boshqa tashkiliy-huquqiy shaklga o'zgartirish to'g'risida qarorlar qabul qilindi.

Korxonalarni korporativ boshqarish bo'yicha ilg'or xalqaro tajribani o'rganish asosida aksiyadorlik jamiyatlarining yangi na'munaviy tuzilmasi

ishlab chiqildi va tasdiqlandi. SHu tariqa, zamonaviy korporativ boshqaruv tizimi talablarini inobatga olgan holda, Lavoziim va kasblarning yangi klassifikatori ishlab chiqildi va tasdiqlandi, unga bozor iqtisodiyoti talablariga mos keladigan 566 ta yangi toifa kiritildi.

Ana shu klassifikator asosida rahbarlar tarkibi attestatsiyadan o'tkazildi. Rahbar kadrlarning korporativ boshqaruvning zamonaviy usul va prinsiplari, menejment va marketing bo'yicha bilimlarini baholash ushbu sinovning asosiy maqsadi qilib qo'yildi. Uning natijalariga ko'ra, attestatsiya qilingan 721 nafar rahbar xodimning yarmi – 49 foizi attestatsiyadan o'tgan bo'lsa, ularning har uchinchisi attestatsiyadan shartli ravishda o'tkazilgan, 20 foizi yoki har beshinchi rahbar esa egallab turgan lavozimiga loyiq emas, deb topilgan.

Mamlakatimiz iqtisodiyotini tarkibiy o'zgartirish, tarmoqlarni modernizatsiya qilish, texnik va texnologik yangilashga doir loyihalarni amalga oshirish uchun investitsiyalarni jalb qilish borasida bajarilayotgan ishlar alohida ehtiborga loyiq.

2015 yilda ana shu maqsadlarga barcha moliyalashtirish manbalari hisobidan 15 milliard 800 million AQSH dollari miqdorida investitsiyalar jalb etildi va o'zlashtirildi. Bu 2014 yilga nisbatan 9,5 foiz ko'p demakdir. Jami investitsiyalarning 3 milliard 300 million dollardan ziyodi yoki 21 foizdan ortig'i xorijiy investitsiyalar bo'lib, shuning 73 foizi to'g'ridan-to'g'ri chet el investitsiyalaridir.

Investitsiyalarning 67,1 foizi yangi ishlab chiqarish quvvatlarini barpo etishga yo'naltirildi. Bu esa 2015 yilda umumiy qiymati 7 milliard 400 million dollar bo'lgan 158 ta yirik ishlab chiqarish ob'ekti qurilishini yakunlash va foydalanishga topshirish imkonini berdi.

Masalan, Toshkent issiqlik elektr stantsiyasida 370 megavatt quvvatga ega bo'lgan bug'-gaz qurilmasi barpo etildi, Chorvoq GESi gidrogeneratorlari modernizatsiya qilindi, Qo'ng'irot soda zavodida kaltsiylashtirilgan soda ishlab chiqarish kengaytirildi, «Samarqandkimyo» aksiyadorlik jamiyatida

240 ming tonna quvvatga ega bo'lgan murakkab tarkibli yangi o'g'itlar ishlab chiqarish korxonasi ishga tushirildi. Shuningdek, «Motor zavodi» aksiyadorlik jamiyatining faoliyat ko'rsatmayotgan ishlab chiqarish maydonlarida traktor tirkamalari, jumladan, katta hajmli tirkamalar, maishiy texnika uchun tarkibiy qismlar va boshqa mahsulotlar ishlab chiqarish tashkil etildi.

Ana shunday muhim ob'ektlar haqida gapirganda, janubiy koreyalik investor va mutaxassislar bilan hamkorlikda Surg'il koni negizida barpo etilgan Ustyurt gaz-kimyo majmuasini alohida ta'kidlamogchiman. Umumiy qiymati 4 milliard dollardan oshadigan ushbu majmua dunyodagi eng zamonaviy, yuqori texnologiyalar asosida ishlaydigan, yirik korxonalardan biri bo'ldi. Majmuaning ishga tushirilishi yiliga 83 ming tonna noyob polipropilen mahsulotini ishlab chiqarish imkonini beradi. Holbuki, bu mahsulot ilgari mamlakatimizga chetdan, katta valyuta hisobiga olib kelinar edi. Ayni vaqtda mazkur korxona polietilen ishlab chiqarish hajmini 3,1 barobar ko'paytirish, mingdan ziyod yuqori malakali mutaxassislarni ish bilan ta'minlash uchun imkoniyat yaratishi bilan ulkan ahamiyatga egadir.

Xorazm viloyatida «Jeneral motors – O'zbekiston» aktsiyadorlik jamiyatida umumiy qiymati qariyb 6 million dollarlik loyiha asosida «Shevrole Labo» kichik yuk mashinasi ishlab chiqarish yo'lga qo'yildi. Bu yerda yiliga fermerlarimiz va xususiy tadbirkorlarimiz uchun juda zarur bo'lgan 5 mingta ana shunday mashina ishlab chiqariladi. Shuni tahkidlash joizki, ushbu modelg' yangi «Xorazm avto» zavodida tayyorlanayotgan «Damas» va «Orlando» avtomobillaridan keyingi uchinchi turdagi avtomobilg' bo'ldi.

Namangan viloyatining Pop tumanida 130 kilovatt quvvatga ega bo'lgan quyosh fotoelektr stantsiyasi ishga tushirildi. Hozircha bu loyiha sinovdan o'tkazilmoqda. 2020 yilga borib mamlakatimizda har biri 100 megavatt quvvatga ega yana uchta quyosh elektr stantsiyasini foydalanishga topshirish rejalashtirilmoqda.

Samarqand – Qarshi temir yo'l uchastkasida yuqori tezlikda harakatlanadigan «Afrosiyob» elektr poezdi qatnovi yo'lga qo'yildi. Bu Toshkent – Qarshi yo'nalishi bo'yicha yo'lovchi tashish sifati va surhatini oshirish imkonini bermogda. Natijada poytaxtimizdan Qashqadaryo viloyatiga va Qarshidan Toshkentga yo'lovchilar tashish vaqti ikki barobar qisqardi.

Iqtisodiyot va xizmat ko'rsatish sohasining yuqori surhatlar bilan barqaror o'sishi biz uchun eng muhim ustuvor yo'nalish bo'lgan – aholi bandligini tahminlash, avvalambor, kasb-hunar kollejlari va oliy o'quv yurtlari bitiruvchilarini ishga joylashtirish uchun zarur sharoitlar yaratdi.

2015 yilda mamlakatimizda 980 mingdan ortiq ish o'rni tashkil qilingan bo'lsa, shuning 60 foizdan ziyodi qishloq joylarda yaratildi.

Kollejlarning 480 mingdan ortiq bitiruvchisi ish bilan tahminlandi. Tijorat banklari tomonidan ularga o'z biznesini tashkil qilish uchun 280 milliard so'mga yaqin imtiyozli kreditlar ajratildi va bu 2014 yilga nisbatan 1,3 barobar ko'pdir.

2015 yilda iqtisodi erishganimiz aholi daromadlarini yanada ko'paytirish, odamlarimizning hayot darajasi va sifatini oshirish uchun yotimizni yuqori surhatlar bilan barqaror rivojlantirishga mustahkam asos yaratdi.

O'tgan yili ta'lim-tarbiya sohasini yanada isloh etish va takomillashtirish masalasi ham diqqat markazimizda bo'ldi. Mamlakatimizda tahlim-tarbiya sohasiga har yili sarflanayotgan xarajatlar yalpi ichki mahsulotga nisbatan 10-12 foizni tashkil etmogda. Bu YUNESKOning mamlakatni barqaror rivojlantirishni tahminlash uchun tahlimga yo'naltirilishi zarur bo'lgan investitsiyalar miqdori bo'yicha tegishli tavsiyalaridan, yahni 6-7 foizdan qariyb 2 barobar ko'pdir.

2015 yilda bu sohada 384 ta obhektning moddiy-texnik bazasini yanada rivojlantirish va mustahkamlash bo'yicha qiymati 423 milliard so'mlik ishlar amalga oshirildi, namunaviy loyihalar asosida 29 ta yangi umumtahlim maktabi barpo etildi, 219 ta maktab rekonstruktsiya qilinib, 136 tasi kapital tahmirlandi.

O'zbekiston davlat jahon tillari universitetida 2 ming 200 talabaga mo'ljallangan yangi zamonaviy o'quv korpusi, sport majmuasi, shuningdek, o'quv jarayoniga jalb etilgan xorijlik mutaxassislar uchun mehmonxona barpo etildi. Navoiy davlat konchilik institutida yangi o'quv binosi qurilishi nihoyasiga yetkazildi.

Oliy tahlim sohasida oliy o'quv yurtlarining professor-o'qituvchilarini muntazam qayta tayyorlash bo'yicha mutlaqo yangi, takomillashtirilgan tizim joriy qilindi. 15 ta tayanch oliy o'quv yurtida oliy tahlim muassasalari rahbarlari va pedagog kadrlarini qayta tayyorlash hamda malakasini oshirish kurslari tashkil etildi. Mazkur kurslarda oliy o'quv yurtlarining 2 ming 700 ga yaqin o'qituvchisi malaka oshirdi.

O'tgan 2015 yilda amalga oshirgan keng ko'lamli ishlarimiz bilan faxrlanishga bugun bizning barcha asoslarimiz bor.

Biz ozod va obod Vatanimiz mustaqilligining qutlug' 25 yilligi keng nishonlanadigan 2016 yilga katta maqsad va rejalar bilan qadam qo'ydik. Yangi tariximizning eng yorqin sahifasini tashkil etadigan ana shu buyuk sanaga har tomonlama munosib va salmoqli hissa qo'shish O'zbekistonning har bir fuqarosi uchun ulkan sharafdir, desam, ayni haqiqatni aytgan bo'laman.

Albatta, 2016 yil biz uchun oson bo'lmaydi, ammo, ishonchim komil – ko'pni ko'rgan xalqimizning fidokorona mehnati, azmu shijoati bilan barcha ko'rsatkichlar bo'yicha yangi yilimiz 2015 yildan ziyoda bo'ladi, aslo kam bo'lmaydi. Bunga hech qanday shubha bo'lishi mumkin emas¹.

O'zbekiston Respublikasining "Ta'lim to'g'risida"gi qonuniga va "Kadrlar tayyorlash milliy dasturi"ga tayanib, O'zbekiston Vazirlar Mahkamasining "O'zbekiston Respublikasining O'rta maxsus, kasb - hunar ta'limini tashkil etish chora - tadbirlari to'g'risida"gi 1998- yil 13-mayda chiqarilgan 204 - sonli qaroriga binoan akademik litseylarda, boshqa aniq

¹ Ўзбекистон Республикаси Президенти Ислон Каримовнинг мамлакатимизни 2015 йилда ижтимоий-иқтисодий ривожлантириш якунлари ва 2016 йилга мўлжалланган иқтисодий дастурнинг энг муҳим устувор йўналишларига бағишланган Вазирлар Маҳкамаси мажлисидаги маърузаси

fanlar qatorida fizika fani ham chuqur o'rganila boshlandi. Oliy va o'rta maxsus hamda Xalq ta'limi vazirliklarining 2003- yil 16- oktyabrdagi 256/251- sonli qo'shma buyrug'i bilan tasdiqlangan, akademik litsey va kasb-hunar kollejlari uchun Fizika fanidan uzviylashgan o'quv dasturi joriy etildi. Ushbu hujjatlar asosida fizika fanini akademik litsey va kasb-hunar kollejlariga o'qitish jarayoni bosqichma-bosqich amalga oshirilib borilmoqda. Hozirda belgilangan asosiy vazifalardan biri ilm-fanni yanada rivojlantirish, iqtidorli va qobiliyatli yoshlarni ilmiy faoliyatga keng jalb etish, ularning o'z ijodiy va intellektual salohiyatini ro'yobga chiqarishi uchun sharoit yaratishga doir kompleks chora-tadbirlarni ishlab chiqishdir.

Mavzuni dolzarbligi: Xozirgi kunda YArimo'tkazgichlar asosidagi kvant o'ra, kvant ip va kvant nuqta kabi past o'lchamli sistemalardagi elektron yoki kovaklar xossalarini o'rganish xozirgi kundagi dolzarb masalalardan biridir yarimo'tkazgichlar asosidagi nanotuzilmalar fizikasi - chip sturukturalar, tok tashuvchilarni boshqarish nanoelementlari kabi eng dolzarb masalalarni o'z ichiga olgan soxa xisoblanadi.

Mavzuni o'rganilganlik darajasi. YArimo'tkazgichlar asosidagi kvant o'ra, kvant ip va kvant nuqta kabi past o'lchamli sistemalardagi elektron yoki kovaklar xossalarini o'rganish xozirgi kundagi dolzarb masalalardan biridir.

Ma'lumki, bunday strukturalarning makroskopik xarakteristikalarini gazning energiya xolatlar zichligiga bog'liq bo'lib, shu tufayli struktura o'lchamiga bog'liq ravishda ossillyasion tabiatga ega. Bunga tok tashuvchilarni energiyasini fazoviy kvantlanishi sabab bo'ladi. Struktura o'lchami ortib borishi bilan xarakteristikalar ossillyasiyasi kamaya boradi va o'zini xajmiy kristall kabi tutadi. Odatda, energiya spektrini kvantlanishiga bog'liq bunday effektlar tok tashuvchilarning xarakatchanligi yuqori bo'lgan yarimo'tkazgichli materiallarda past temperaturalarda kuzatiladi.

Tadqiqot maqsadi: Yarim o'tkazgichlar asosidagi nanotuzilmalarda ba'zi kvazizarralarni xossalarini tadqiq qilish va elektronlarni yoki kovaklarni fononlar bilan o'zaro tasirini xisobga olgan xolda energetik xolatlarni xisoblash usullarini takomillashtirish

Tadqiqot vazifalari. Ularda ilgari nomalum bo'lgan yangi kvant xodisalari mavjud bo'lishi xam extimoldan xoli emas. SHuning uchun ularni o'ta kichik soxalarda o'zini qanday tutishini o'rganish - kvant mexanikasi asosida enrgetik xolatlarini baxolashni talab etiladi.

Tadqiqot obyekti. YArimo'tkazgichlar asosidagi kvant o'ra, kvant ip va kvant nuqta kabi past o'lchamli sistemalardagi elektron yoki kovaklar xossalarini o'rganish oldin bizga ma'lum bo'lgan 1-2- sathlarni o'rgangan bo'linsa bu dissertatsiya ishida 3-4-5-va boshqa sathlarda ham o'rganildi va namuna olindi.

Dissertatsiya ishining ilmiy tadqiqot rejalari bilan bog'liqligi

Ushbu tadqiqot ishi "Kondensatlangan muhitlar fizikasi va fizika o'qitishning dolzarb muammolari"Respublika ilmiy-amaliy konferensiya (Namangan,2015-yil 13-iyun) International Journal of Applied Mejdunarodnaya konferensiya

«Fundamentalnye i prikladnye voprosy fiziki» (Tashkent.5-6 noyabrya)

Physics (SSRG-IJAP) – volume 2, Issue 4, July-August 2015.
«Fundamentalnye i prikladnye voprosy fiziki». (Tashkent 5-6 noyabrya)

22 oktyabr, 2015. Fiziko-texnicheskiy institut. NPO «Fizika-Solnse)
NamDU fizika kafedrasida F-2-35 "Kvant nuqtali getero- va

nanotuzilmalardagi eksitonlarni, polyaronlarni, bipolyaronlarni va ko‘chish hodisalarini tadqiq etish asosida nurlagichlar, fotoelementlar va boshqa turdagi optoelektron asboblarning samaradorligini yaxshilash”fundamental grant asosida bajarildi.

Tadqiqot natijalarining e’lon qilinganligi.

Dissertatsiya mavzusiboyicha magistrning quyidagi maqolalari chop etilgan

1. P.J. Baymatov, D.A.Yusupov A.S.Mahmudov Energeticheskie urovni elektrona

vzaimodeystvuyushey s polarizatsiey sred v usloviyax prostranstvennogo kvantovaniya Kondensatlangan muxitlar fizikasi va fizika ukitishning dolzarb muammolari

NamDU, Namangan 2015. 81-83 bet

2. G.Gulyamov, P.J. Baymatov, B.T.Abdulazizov, A.S.Mahmudov // Thermal broadening of the

density of states of the quasi-two-dimensional electron gas with non-parabolicity of energy

spectrum // SSRG International Journal of Applied Physics (SSRG-IJAP) – volume 2, Issue

3. Г.Гулямов, П.Ж. Байматов, Б.Т. Абдулазизов, А.С. Махмудов // Квазидвумерный

электронный газ: энергетический спектр, плотность состояний, тепловое уширение

уровней // Международная конференция «Фундаментальные и прикладные вопросы

физики». //Ташкент. НПО. 21-22 октябрь, 2015. Физико-технический институт. НПО

«Физика-Солнце» АН РУз

4. П.Ж. Байматов, Ш.Т.инойтов, Б.Т. Абдулазизов, А.С. Махмудов // Спектр полярона в квантовой точке // Международная конференция «Фундаментальные и прикладные вопросы физики». //Ташкент. НПО. 21-22 октябрь, 2015. Физико-технический институт.
НПО «Физика-Солнце» АН РУз.

Tadqiqot usullari .Fazoviy kvantlanuvchi tuzilmalarda kvanlovchi o'ra kvant nuqta nanotuzilmalarda xolatlar zichligi o'rganildi.

Tadqiqotninig ilmiy farazi.

F-2-35 fundamental grant asosida yarim o'tkazgichlar asosidagi nanotuzilmalarda ba'zi kvazizarralarni xossalarini tadqiq qilishga qaratilgan.

. Himoyaga olib chiqadigan asosiy holatlar

Kvazi ikki o'lchovli elektron gazini energetik xolatlar zichligi - dispersiyani noparabolikligini xisobga olingan xolda analitik va sonli taxlil etiladi. Temperatura ortganda sakrab o'zgarayotgan energiya xolatlar zichligi - satxlarni kengayishi sababli silliqlasha boradi va yuqori temperraturalarda deyarli yuvilib ketar ekan.

YArimo'tkazgichlar asosidagi kvant o'ra, kvant ip va kvant nuqta kabi past o'lchamli sistemalardagi elektron yoki kovaklar xossalarini o'rganish kelib chiqadi. Ma'lumki, bunday strukturalarning makroskopik xarakteristikolari gazning energiya xolatlar zichligiga bog'liq bo'lib, shu tufayli struktura o'lchamiga bog'liq ravishda ossillyasion tabiatga ega. Bunga tok tashuvchilarni energiyasini fazoviy kvantlanishi sabab bo'ladi. Struktura o'lchami ortib borishi bilan xarakteristikalar ossillyasiyasi kamaya boradi va o'zini xajmiy kristall kabi tutadi. Odatda, energiya spektrini kvantlanishiga bog'liq bunday effektlar tok tashuvchilarning xarakatchanligi yuqori bo'lgan yarimo'tkazgichli materiallarda past temperaturalarda kuzatiladi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy-amaliy ahamiyati

Magistrlik dissertatsiyasida foydalanilgan va rivojlantirilgan «yarimo‘tkazgichli nanotuzilmalarda kvazizarrachalarni xarakteristikasini xisoblash usullari» - yangi turdagi yarimo‘tkazgichli asboblarni modellashtirishda foydalanish mumkin.

Natijalarni amalga oshirilishi

O‘tkazilgan tadqiqotlarga asoslanib xulosa qilish mumkinki, ushbu ishda kvant nuqtadagi elektronni energiya satxlarini aniqlash uchun polyaron effektlarni xisobga olishda BP metodi qo‘llanildi, kvant nuqtani siquvchi potentsiali ko‘rinishini - parabolik deb olindi. differensial tenglamani echish qiyinligi sababli uni echimini ba’zan kuchli va kuchsiz o‘zaro ta’sir rejimlarda olingan aniq echimlarni chiziqli kombinatsiyasidan foydalanishadi. Ushbu metodni xajmiy polyar yarimo‘tkazgichlarda qo‘llanilganda, polyaronli xolat energiyasini interpolyasion baxolashga erishiladi.

Dissertatsiyatarkibining qisqacha tavsifi

Tadqiqot ishi kirish, IV bob, 18 paragraf, boblar boyicha xulosalar, umumiy xulosa, ilova handa foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxatidantashkil topgan. Tadqiqod ishi jami sahifada bayon etilib,

Fazoviy kvantlanishni kvanto-mexanik asoslari

I.1. SHredingerning statsionar tenglamasi.

Mikrozarrachakarni(masalan, elektronni)biror maydondagi harakati kvant mehanikasi orqali bayon qilinib, SHredinger tenglamasini yechib

topiladi. Bitta zarrachaning statsionar holati uchun bu tenglama uch o'lchovli Dekart fazosida quyidagicha yoziladi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Bu yerda U zarrachani tashqi maydondagi potensial energiyasi, m massasi ψ -to'lqin funksiyasi, E -to'la energiyasi $\hbar$ -Plank doimiysi, Δ – Laplas operatori (yoki Laplasian)

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1)$$

Bu tenglama odatda tashqi maydon potensial funksiyasi $U(x, y, z)$ va zarracha massasi m beriladi va ψ -funksiya hamda E -to'la energiyani topish talab etiladi. Ushbu tenglama ikkinchi tartibli differensial tenglama bo'lgani bois, uni integrallashda yechimga ikkita A, B o'zgarmas kirib qoladi .

$$\psi(x, y, z, A, B)$$

Demak , $U(x, y, z)$, m berilganda 1-masalani to'la yechimini topish uchta nomalum A, B, E ni aniqlashga keltiriladi. Buning uchun . (1.1) masalada $\psi(x, y, z, A, B)$ funksiya uchun ikkita chegaraviy shart xamda to'lqin funksiyani quyidagi normallashtirish shartidan foydalaniladi

$$\iiint_V \psi^2(x, y, z, A, B) dx dy dz = 1 \quad (2) \quad \text{Umumiy}$$

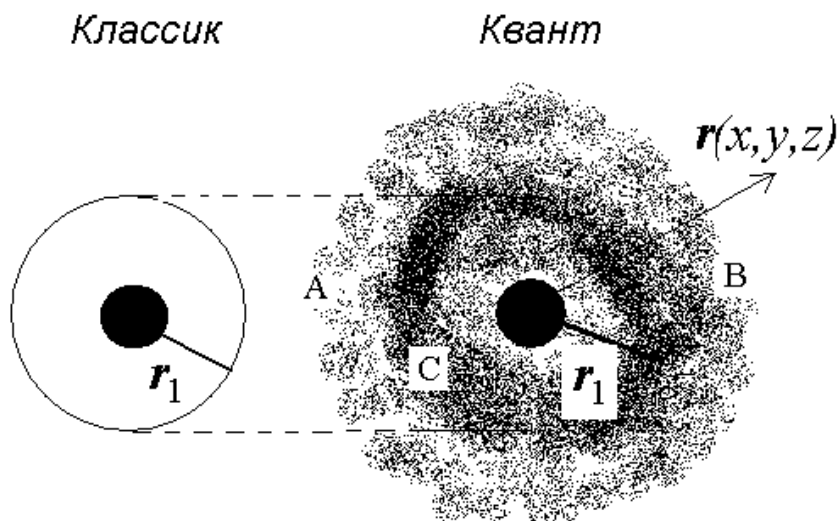
xolda, to'lqin funksiya fizik ma'noga ega bo'lishi uchun, qaralayotgan sistemaga tegishli butun fazoda chekli, bir qiymatli va uzluksiz bo'lish shart.

Korpuskulyar – to'lqin dualizmiga ko'ra, mikrozarra bir paytda xam to'lqin xam zarra tabiatiga ega.

$$|\psi(x, y, z)|^2 = \psi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) \quad (3a)$$

Kattalikni mikrozarrachani fazoning x, y, z nuqtasida topilish extimoli, zarracha buluti zichligi deb xam yuritiladi.

Masalan vodorod atomida proton atrofida aylanayotgan elektronni tasavvur qilaylik. Klassik mexanika ko‘ra, orbitadagi xarakatlanayotgan elektronni oyga, protonni esa yerga qiyoslash mumkin.



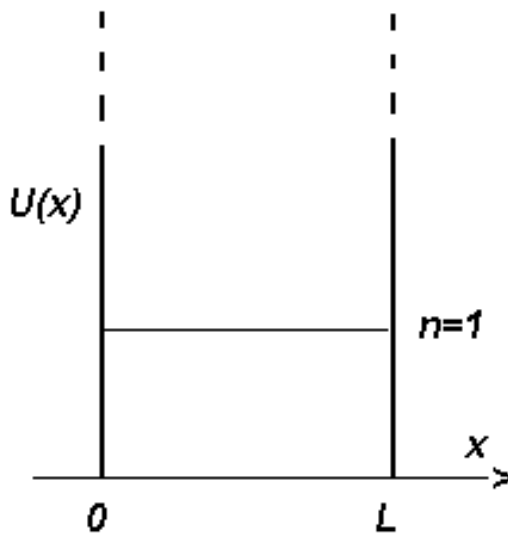
I.2. Bir o‘lchovli cheksiz chuqur potensial o‘ra.

Ikki tomoni cheksiz baland to‘siq bilan chegaralangan potensial o‘radagi (bir o‘lchovli xarakat) zarrani xarakatini qaraylik. Bu masala uchun SHredinger tenglamasi quyidagicha yoziladi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4)$$

Bu erda potensial energiya operatori uzlukli funksiya bo‘lib quyidagicha yoziladi

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & x < 0, x > L \end{cases} \quad (5)$$



Zarracha faqat o‘ra ichida xarakatlanadi. O‘ra ichida esa (5) ga asosan potensial energiya nolga teng. SHu sababli o‘ra ichida $0 < x < L$ (4) tenglamani quyidagi ko‘rinishda yozib olamiz

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + k^2 \psi(x) = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6)$$

Buning qanoatlantiruvchi echim

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha) \quad (7)$$

Bu erda A va α ixtiyoriy o‘zgarmaslar, noaniq integrallash doimiylari. (7) echim qanoatlantirish lozim bo‘lgan ikkita chegaraviy shart

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0 \quad (8)$$

quyidagilarni beradi

$$\alpha = 0, \quad \sin(kL) = 0, \quad kL = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

Bu erda fizik ma'noga ega bo'lmagan echimlar $n = 0, -1, -2, -3, \dots$ tashlab yuborildi. Demak (8) endi

$$\psi(x) = A \sin(kx), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (10)$$

Ikkita chegaraviy shartdan foydalanib bo'ldik, yana boshqa noma'lum - A qoldi. Buni topish uchun bizda yana normallashtirish sharti bor. Ushbu masala uchun u quyidagicha yoziladi

$$\int_0^L \psi^2(x) dx = 1 \quad (11)$$

Integralni xisoblaylik

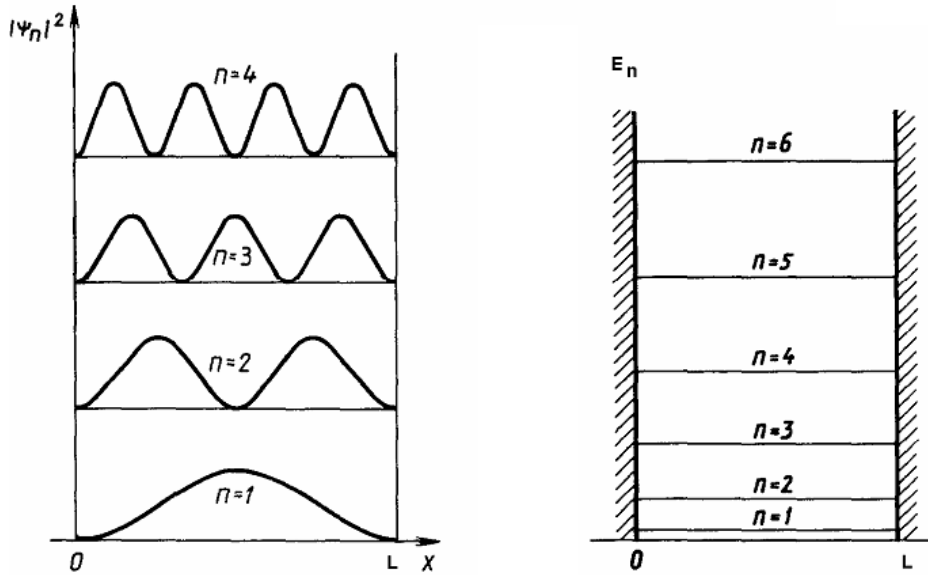
$$\int_0^L \psi^2(x) dx = A^2 \int_0^L \sin^2(kx) dx = A^2 \frac{kL - \cos(kL) \sin(kL)}{2k} = A^2 \frac{L}{2} = 1$$

Bundan $A = \sqrt{2/L}$. Demak, yakuniy to'liqin funksiya ko'rinishi

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}, \quad k_n L = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

O'ra ichida zarrachani energiyasini qabul qilish mumkin bo'lgan qiymatlari diskret bo'lib, u quyidagiga teng

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$



Ixtiyoriy ketma ket ikkita satx orasidagi farq (13) dan

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (2n+1)$$

Agar bunga elektron massasi $10^{-27} \tilde{a}$ ni qo'yib, $L = 10 \tilde{n}i$ deb (bu misolni metallidagi erkin elektronlar deyish mumkin) xisoblasak

$$\Delta E_n = 10^{-16} (2n+1) \text{ eV}$$

satxlar o'ta quyuq, ya'ni tutash spektr deyish mumkin. Agar o'ra kengligini atomlar razmerida $L = 10^{-8} \tilde{n}i$ deb olinsa,

$$\Delta E_n = 10^2 (2n+1) \text{ eV}$$

diskretlik kuchli namoyon bo'ladi.

I.3. Uch o'lchovli cheksiz chuqur potensial o'ra

Shu paytgacha qarab chiqilgan masalalarda ψ funksiya faqat bitta ku ordinataga bog'liq edi. Bu paragrafda uch o'lchovli masalaning eng sodda misolni qaraymiz.

Uch o'lchovli otensial o'rada, ya'ni hamma yo'nalishlarda chegaralangan sohaga ega bo'laylik, uning ichida hamma joyda potensial energiya nolga teng, lekin chegaralarida potensial energiya birdaniga cheksizga ortadi va qolgan butun fazoda shundayligicha qoladi. Potensial energiya nolga teng bo'ladigan soha l_1, l_2, l_3 qirrali parallelepiped shakliga ega deb faraz qilamiz

$$U(x, y, z) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z)$$

Bunda $0 \leq x \leq l_1$ bo'lganda $U_x = 0$ $x \leq 0$ va $x \geq l_1$ bo'lganda $U_x = \infty$

$0 \leq y \leq l_2$ $U_y = 0$ $y \leq 0$ va $y \geq l_2$ bo'lganda $U_y = \infty$

$0 \leq z \leq l_3$ $U_z = 0$ $z \leq 0$ va $z \geq l_3$ bo'lganda $U_z = \infty$

Bu hol uchun SHredinger tenglamasini ko'rinishi quyidagicha

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(x, y, z) + [U(x) + U(y) + U(z)] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (15)$$

Agar potensial energiya funksiyasi koordinata o'qlari bo'yicha yig'indi ko'rinishda (ya'ni additiv) bo'lsa, u xolda to'lqin funksiyani o'qlar bo'yicha ko'paytma ko'rinishida tasvirlash mumkin. SHunda o'zgaruvchilar ajralib, xar bir o'q bo'yicha mustaqil uchta tenglamaga keltirish mumkin. Demak

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z) \quad (16)$$

Buni (16) ga qo'yamiz

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\psi(y)\psi(z) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \psi(x)\psi(z) \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + \psi(x)\psi(y) \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right] +$$

$$+ [U(x) + U(y) + U(z)] \psi(x)\psi(y)\psi(z) = E \psi(x)\psi(y)\psi(z)$$

ikkala tomonini $\psi(x)\psi(y)\psi(z)$ ga bo'lsak natijani quyidagicha yozamiz

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(y)} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + U(y) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(z)} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + U(z) = E$$

Endi to'la energiyani o'qlar bo'yicha energiyalar yig'indisi ko'rinishda yozamiz

$$E = E_x + E_y + E_z \quad (17)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E_x \psi(x) \quad (18x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + U(y)\psi(y) = E_y \psi(y) \quad (19y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + U(z)\psi(z) = E_z \psi(z) \quad (20z)$$

Bu tenglamalarning har biri yuqorida keltirilgan bir o'lchovli masalaga keladi va echimlari quyidagicha [(12), (13) ga qarang]

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right), \quad k_{nx} = \frac{\sqrt{2mE_{nx}}}{\hbar}, \quad k_{nx} L_x = n_x \pi, \quad n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{nx} = \frac{\hbar^2 k_{nx}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{2m L_x^2} \quad (21x)$$

$$\psi(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right), \quad k_{ny} = \frac{\sqrt{2mE_{ny}}}{\hbar}, \quad k_{ny} L_y = n_y \pi, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{ny} = \frac{\hbar^2 k_{ny}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_y^2}{2m L_y^2}$$

(22y)

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right), \quad k_{nz} = \frac{\sqrt{2mE_{nz}}}{\hbar}, \quad k_{nz} L_z = n_z \pi, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{nz} = \frac{\hbar^2 k_{nz}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_z^2}{2m L_z^2}$$

(22z)

Bulardan foydalanib, to'la to'liqin funksiya (17) va to'la energiya (20) ni quyidagi holatda yozamiz

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right)$$

(23)

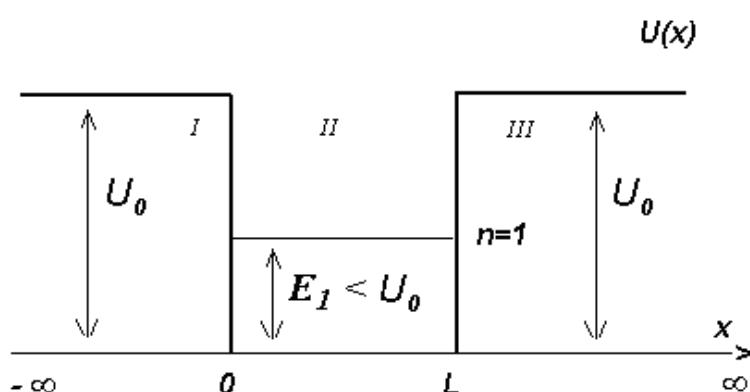
$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (24)$$

Energiyani umumiy ko'rinishi shunday kelib chiqadi.

I.4. Bir o'lchovli chekli potensial o'ra

Bu erda potensial energiya operatori uzlukli funksiya bo'lib, butun o'qi bo'yicha $-\infty$ dan ∞ gacha oraliqda joylashgan. Potensialni uchta soxaga bo'lib olamiz

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & -\infty < x < 0, & \text{I soha} \\ 0, & 0 < x < L, & \text{II soha} \\ U_0, & L < x < \infty, & \text{III soha} \end{cases} \quad (25)$$



SHredinger tenglamasi (5) ni I,II,III soxalar uchun mos xolda quyidagicha yozamiz

$$\frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} - \chi^2 \psi_I(x) = 0, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (26a)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + k^2 \psi_{II}(x) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (26b)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{III}(x)}{\partial x^2} - \chi^2 \psi_{III}(x) = 0, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (26c)$$

Bularni echimlari (integrali) mos xolda quyidagicha ko'rinishga ega

$$\psi_I(x) = ae^{+\chi x}, \quad x < 0 \quad (27a)$$

$$\psi_{II}(x) = b\sin(kx + \alpha), \quad 0 < x < L \quad (27b)$$

$$\psi_{III}(x) = ce^{-\chi x}, \quad x > L \quad (27c)$$

SHredinger tenglamasi ikkinchi tartibli differensial tenglama bo'lib, uni integrallashda ikkita doimiy paydo bo'ladi. Aslida (27a) echimni to'la ko'rinishi $\psi_I(x) = ae^{+\chi x} + a_1e^{-\chi x}$ bo'lish kerak edi. Biroq to'liqin funksiya uzluksiz va chekli bo'lishi lozim. SHu bois, $x < 0$ soxadagi $x \rightarrow -\infty$ qiymatlarda $a_1e^{-\chi x}$ xad cheksizga intilishi sababli bu xadni tashlab yuborish

kerak, ya'ni $a_1 = 0$ deb oldik. Xuddi shuningdek, (27c) echimda $c_1e^{+\chi x}$ xadni tashlab yuborildi: $c_1 = 0$.

Integrallash doimiylari a, b, c, α xamda zarra energiyasi E topilish zarur. Xammasi bo'lib beshta noma'lum mavjud ekan. Bularni topish uchun beshta qo'shimcha shart (tenglama) kerak. Bittasi normallashtirish sharti, uni quyidagicha yozamiz

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x) dx = \int_{-\infty}^0 \psi_I^2(x) dx + \int_0^L \psi_{II}^2(x) dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^2(x) dx = 1 \quad (28)$$

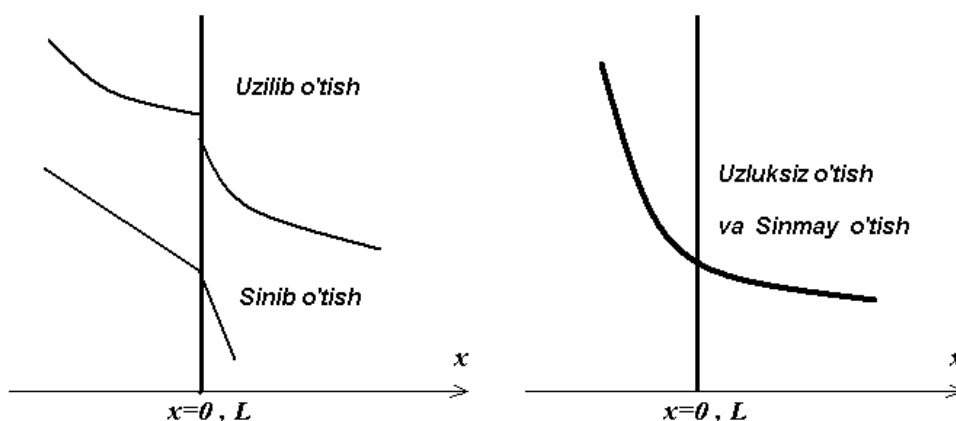
Qolgan to'rtta tenglama – chegaraviy shartlardan iborat: I va II soxadagi to'liqin funksiyalarni xamda ularning birinchi xosilalarini $x = 0$ nuqtada tenglik sharti, xuddi shuningdek II va III soxadagi to'liqin funksiyalarni xamda ularning birinchi xosilalarini $x = L$ nuqtada tenglik sharti:

$$\psi_I(x)|_{x=0} = \psi_{II}(x)|_{x=0}, \quad \psi_{II}(x)|_{x=L} = \psi_{III}(x)|_{x=L} \quad (29a)$$

$$\left. \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=0}, \quad \left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=L} = \left. \frac{d\psi_{III}(x)}{dx} \right|_{x=L}$$

(29b)

To'liqin funksiya uzluksiz bo'lishi lozim, ya'ni $x=0$ va $x=L$ nuqtalarda uzilmaslik kerak, shuning uchun (29a) tengliklar – uzluksizlik sharti deb xam ataladi. Birinchi xosilalarini tenglik sharti (29b) esa, $x=0$ va $x=L$ nuqtalarda to'liqin funksiyalarni sinmay o'tishi lozimligini bildiradi.



Echimlar (27a,b,c) ni (29) shartlarga qo'yib, to'rtta tenglama olami z, normallashtirish tengligi (28) bilan ja'mi beshta tenglama masaladagi barcha beshta

a, b, c, α, E noma'lumlarni topishga etarli. Quyida biz energiyani xisoblash bilan cheklanamiz.

(27a,b,c) ni (29) shartlarga qo'yib, to'rtta tenglama olib, bu tenglamalar nisbatlari α, E ga nisbatan quyidagi ikkita tenglamani beradi

$$\operatorname{tg}(\alpha) = \frac{k}{\chi} = \mu, \quad \operatorname{tg}(kL + \alpha) = -\frac{k}{\chi} = -\mu \quad (30)$$

yoki

$$\sin(\alpha) = \frac{\mu}{\sqrt{1+\mu^2}}, \quad \sin(kL + \alpha) = -\frac{\mu}{\sqrt{1+\mu^2}} \quad (31)$$

Bulardan α ni yo‘qotib, xamda trigonometrik funksiyalarni davriyligini xisobga olib quyidagini olish mumkin (Landau Lifshits)

$$kL = \pi n - 2 \arcsin\left(\frac{\mu}{\sqrt{1+\mu^2}}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (32)$$

(26) dagi k, χ xamda (30) dagi μ ifodalaridan foydalanib, energiya uchun quyidagi transcendent tenglamaga kelamiz

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \left(\pi n - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_n}{U_0}} \right)^2, \quad E_n < U_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (33)$$

Elektronni massasi m , o‘ra kengligi L va chuqurligi U_0 berilsa (33) tenglamadan energiyaning diskret qiymatlarini grafik usulda yoki sonli usulda (masalan, Maple da) xisoblab topish mumkin.

Taxlil qilishda energiya birligi sifatida $E_0 = \hbar^2 / 2mL^2$ ni olsak (33) ni $n=1$ satx uchun quyidagicha yozish mumkin

$$u_0 = \frac{1}{x} \left(\pi - 2 \arcsin \sqrt{x} \right)^2, \quad x = \frac{\varepsilon}{u_0}, \quad \varepsilon = \frac{E_1}{E_0}, \quad u_0 = \frac{U_0}{E_0}$$

Buni $u_0(x)$ funksiya deb qarab, $x=1$, ($x < 1$) nuqta atrofida qatorga yoyib ikkita xad bilan chegaralanamiz

$$u_0 \approx 4(1-x)$$

yoki

$$\varepsilon \approx u_0 - u_0^2/4.$$

Dastlabki birliklarga qaytsak (Landau Lifshits)

$$E_1 \approx U_0 - \frac{U_0^2}{4 (\hbar^2/2mL^2)}$$

Demak, o‘ra chuqurligini ixtiyoriy kichik qiymatlarida xam $E_1 < U_0$, ya’ni bitta satx doim mavjud. Boshqacha aytganda: bir o‘lchovli masalada ixtiyoriy sayoz chuqurlikda xam zarracha bog‘lanib qoladi.

I.5. Uch o‘lchovli chekli potensial o‘ra

Potensial energiya funksiyasi quyidagicha yoziladi

$$U(x, y, z) = U(x) + U(y) + U(z) \quad (34)$$

va u o‘zgaruvchilar bo‘yicha (15) kabi additiv bo‘lgani uchun to‘la to‘lqin funksiya o‘qlar bo‘yicha to‘lqin funksiyalar ko‘paytmasi (17) ko‘rinishda tasvirlasak o‘zgaruvchilarni ajratish mumkin. (34) dagi xar bir o‘q bo‘yicha potensial energiya ko‘rinishi (25) kabi yozish mumkin, masalan

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & -\infty < x < 0, & \text{I soha} \\ 0, & 0 < x < L_x, & \text{II soha} \\ U_0, & L_x < x < \infty, & \text{III soha} \end{cases}$$

$$U(y) = \begin{cases} U_0, & -\infty < y < 0, & \text{I soha} \\ 0, & 0 < y < L_y, & \text{II soha} \\ U_0, & L_y < y < \infty, & \text{III soha} \end{cases}$$

Natijada to'la energiya uchun quyidagini topish mumkin

$$E_{nx,ny,nz} = E_{nx} + E_{ny} + E_{nz} < U_0, \quad (35)$$

$$E_{nx} = \frac{\hbar^2}{2mL_x} \left(\pi n_x - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_{nx}}{U_0}} \right)^2, \quad n_x = 1, 2, 3, \dots \quad (35x)$$

$$E_{ny} = \frac{\hbar^2}{2mL_y} \left(\pi n_y - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_{ny}}{U_0}} \right)^2, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \quad (35y)$$

$$E_{nz} = \frac{\hbar^2}{2mL_z} \left(\pi n_z - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E_{nz}}{U_0}} \right)^2, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (35z)$$

Agar, $U_0 = \infty$ desak, $\arcsin \sqrt{E_{nz}/U_0} = 0$ bo'lib, (35) dan cheksiz chuqur uch o'lchovli o'ra uchun (24) formula kelib chiqadi.

Endi uch o'lchovli o'ra chuqurligi qanday bo'lganda bitta $E_1 < U_0$ satx mavjud bo'la oladi degan masalani taxlil qilamiz. Buning uchun, soddalashtirish maqsadida o'rani kub shakda $L_x = L_y = L_z = L$ deb olamiz. U xolda (35) dan

$$n_x = n_y = n_z = 1, \quad E_{111} = 3E_1 \quad (36)$$

Energiya birligi sifatida $E_0 = \hbar^2 / 2mL^2$ ni olsak (35x) dan

$$u_0 = \frac{3}{x} \left(\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{x}{3}} \right)^2, \quad x = \frac{\varepsilon}{u_0}, \quad \varepsilon = \frac{E_{111}}{E_0}, \quad u_0 = \frac{U_0}{E_0} \quad (37)$$

Bu erdan, $E_{111} \approx U_0$ yoki $x \approx 1$ desak, $u_c \approx 10.952$ ni topamiz.

Demak, o'rada kamida bitta satx mavjud bo'la olishi uchun o'ra chuqurligi

$$U_c > 10.952 \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (38)$$

shartni qanoatlantirish kerak ekan, aks xolda o'ra zarrachani tuta olmaydi.

I.6. Bir o'lchovli garmonik ossillyator

Siljishga qarama qarshi kuch (Guk) ta'sirida klassik zarracha garmonik tebranma xarakat qiladi. Buni garmonik ossillyator deb atashadi. Klassik xarakat tenglamasi

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F = -kx, \quad V(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

SHredinger tenglamasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (39)$$

Garmonik ossillyatorni xarakterli o'lchami $\sqrt{\hbar / m\omega}$ kattalik bo'lib, uni uzunlik birligi sifatida ishlatiladi

$$z = \frac{x}{l_0}, \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (40)$$

U xolda (39) quyidagicha yoziladi

$$-\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + z^2 \psi(z) = \lambda \psi(z), \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (41)$$

Bu tenglamaning echimi (xususiy funksiyalar va xususiy qiymatlar - $\psi_n(z)$, λ_n , yoki to'liq funksiyalari va unga mos energiyaning diskret qiymatlari) analitik xolda topilgan. Ular quyidagicha

$$\psi_n(z) = N_n e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z), \quad z = \frac{x}{l_0}, \quad N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! l_0 \sqrt{\pi}}} \quad (42)$$

$$\lambda = 2n+1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (43)$$

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z^2}) \quad (44)$$

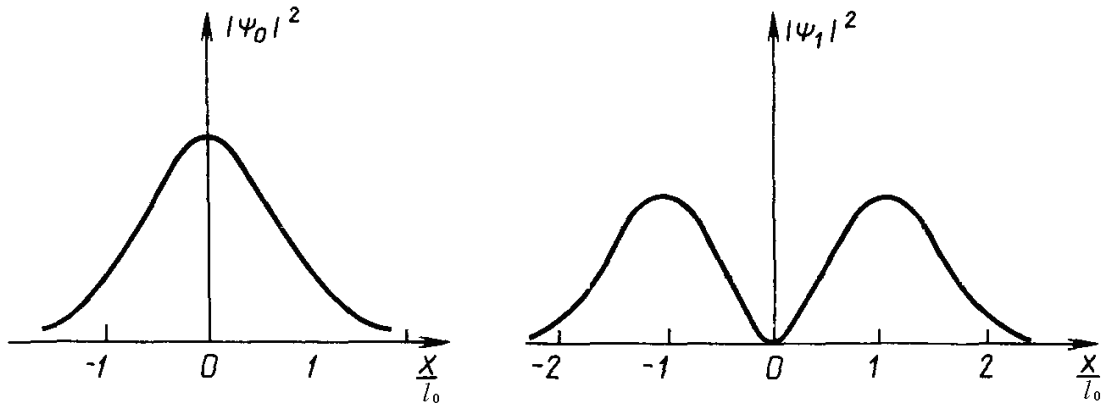
$H_n(z)$ funksiyani - Ermit polinomlari deb ataladi. Dastlabki birliklarda (42-44) quyidagicha yoziladi

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (45)$$

$$\psi_0(x) = N_0 e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}} H_0(x/l_0), \quad N_0 = \frac{1}{\sqrt{l_0 \sqrt{\pi}}}, \quad H_0(x/l_0) = 1 \quad (46)$$

$$\psi_1(x) = N_1 e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}} H_1(x/l_0), \quad N_1 = \frac{1}{\sqrt{2l_0 \sqrt{\pi}}}, \quad H_1(x/l_0) = 2 \frac{x}{l_0} \quad (47)$$

$$\psi_2(x) = N_2 e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}} H_2(x/l_0), \quad N_2 = \frac{1}{\sqrt{8l_0}\sqrt{\pi}}, \quad H_2(x/l_0) = 4\frac{x^2}{l_0^2} - 2 \quad (48)$$



I.7. Uch o'lovli garmonik ossillyator

SHredinger tenglamasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + \frac{m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)}{2} \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (39)$$

Potensial energiya adittiv bo'lgani uchun o'zgaruvchilar ajraladi. U xolda, xususiylar funksiyalar va xususiylar qiymatlar ($l_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$)

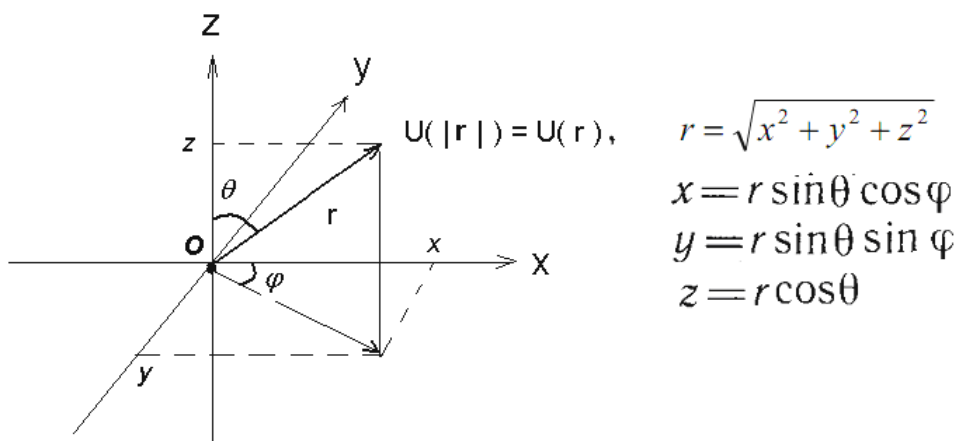
$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad n = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (45)$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = N e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{2l_0^2}} H_{n_x}\left(\frac{x}{l_0}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{l_0}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{l_0}\right), \quad N = \frac{1}{\sqrt{2^n} \sqrt{n_x! n_y! n_z!} \left(\frac{1}{\sqrt{l_0} \sqrt{\pi}}\right)^3} \quad (46)$$

II. Markaziy maydondagi xarakat .

II.1. Markaziy maydondagi xarakat xususiyatlari

Markaziy sferik simmetriyalı maydon deb potensial energiya funksiyasi faqat biror markazgacha bo'lgan masofagagina bog'liq bo'lgan maydonga aytiladi. Markaz sifatida sferik koordinatalar sistemasini o'rtasi O nuqtani olish qulay.



Dekart koordinatalarida laplasian $\Delta = \Delta_x + \Delta_y + \Delta_z$ bo'lib, sferik koordinatalar sistemasida quyidagicha yoziladi

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

(47)

SHredinger tenglamasini quyidagicha yozaylik

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} \psi + k^2(r) \psi = 0$$

(48)

bu erda

$$k^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))$$

(49)

O'zgaruvchilarni ajratish uchun to'liqin funksiyani quyidagicha qidiramiz

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

(50)

Buni (48) ga qo'yib, so'ng $r^2 / R(r)Y(\theta, \varphi)$ ga ko'paytirib quyidagini topamiz

$$\frac{r^2 \Delta_r R(r)}{R(r)} + r^2 k^2(r) = - \frac{\Delta_{\theta,\varphi} Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)}$$

(51)

$\Rightarrow$ Buning chap tomonida faqat r ga, o'ng tomonida esa faqat θ, φ ga bog'liq kattaliklar turgani sababli – bu tenglik bajarilishi uchun, ikkala tomoni xam ajratish doimiysi deb ataluvchi bitta kattalik λ ga teng bo'lish shart.

SHunday qilib, to'liqin funksiyaning radial qismi $R(r)$ va burchakli qismi $Y(\theta, \varphi)$ uchun quyidagi tenglamalarni olamiz

$$\Delta_r R(r) + \left(k^2(r) - \frac{\lambda}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (52)$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (53)$$

Oxirgi (53) tenglama r o'zgaruvchiga xam potensial energiyaga xam bog'liq emas. SHu bois bu tenglama echimi barcha markaziy maydonlar uchun xam o'rinli bo'ladi .

(53) tenglamada xam o'zgaruvchilarni ajratish uchun $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ deb, bo'linish doimiysini esa m^2 deb olsak, u xolda $\Theta(\theta)$ va $\Phi(\varphi)$ funksiyalar uchun bu tenglamalarni olamiz

$$\Delta_{\theta} \Theta(\theta) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2(\theta)} \right) \Theta(\theta) = 0 \quad (54)$$

$$\Delta_{\varphi} \Phi(\varphi) + m^2 \Phi(\varphi) = 0 \quad (55)$$

bu erda

$$\Delta_{\theta} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad \Delta_{\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (56)$$

Demak, to'la masalani echish uchun dastlab (55) tenglamani echib, $\Phi(\varphi)$ va m^2 ni topib, so'ng (54)) tenglamani echib λ va $\Theta(\theta)$ ni bilgan xolda λ ni (52) ga qo'yib radial tenglamani echib $R(r)$ va E topiladi.

To'la to'lqin funksiya (50) ni birga normallashtirish uchun quyidagilar bajarilish kerak

$$\int_0^{\infty} R^*(r) R(r) r^2 dr = 1 \quad (57)$$

$$\int_0^{\pi} \Theta^*(\theta) \Theta(\theta) \sin \theta d\theta = 1 \quad (58)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi) \Phi(\varphi) d\varphi = 1 \quad (59)$$

(55) tenglamani xususiy echimini ikki xil tasvirlash mumkin:

$$\Phi(\varphi) = C e^{im\varphi} \quad (60)$$

va

$$\Phi(\varphi) = A \cos(m\varphi + \alpha) \quad (61)$$

Bu ikki echimni turlicha talqin qilinadi. Birinchi echim (60) - aylana bo'yicha yugiruvchi to'lqinga mos kelib, elektronni bir tekis aylanishini bildiradi. Ikkinchi echim (61) – turg'un to'lqinni bildirib, elektronni aylana yoyi bo'ylab tebranishini bildiradi. $\Phi(\varphi)$ funksiya elektronni yadro atrofida aylanishini tasvirlash uchun, uni aylana bo'yicha yugiruvchi to'lqin (60) ko'rinishda olish zarur.

(60) xususiy echimga qo'shma ikkinchi xususiy echim $e^{-im\varphi}$ ga proporsional bo'lgani uchun, uni ishlatmasdan m ni musbat va manfiy qiymatlarini xisobga olinsa bas. $\Phi(\varphi)$ echim bir qiymatli bo'lishi lozim, ya'ni φ burchak 2π gacha aylansa, $\Phi(\varphi)$ o'ziga qaytishi – yoki davriy bo'lishi kerak

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \quad (62)$$

Bundan quyidagi kelib chiqadi

$$e^{i2\pi m} = 1$$

Bu tenglik bajarilishi uchun (magnit kvant soni)

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (63)$$

bo'lish zarur, bu (55) masalani xususiy qiymatlaridir.

(59) normallashtirish shartidan $C = 1/\sqrt{2\pi}$ ni topish mumkin. Demak, (55) ni xususiy funksiyalari

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (64)$$

Tekshirib ko'rish mumkinki, quyidagi ortonormallik sharti bajariladi

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}$$

(54) tenglama

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (65)$$

va

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l, \quad |m| < l \quad (66)$$

bo'lganda analitik echimga ega ekan, $|m| > l$ da esa echim nolga aylanar ekan.

Bira to'la (53) ni umumiy echimini keltiramiz

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N_l^{|m|} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (67)$$

buni sferik funksiyalar deb ataladi. Bu erdagi $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ - Lejandrning qo'shma polinomlari deyishadi va u quyidagicha aniqlanadi

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l \quad (68)$$

Sferik funksiyani normallashtirish shartini quyidagicha yoziladi

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \quad (69)$$

Bundan normallashtirish doimiysi $N_l^{|m|}$ ni topamiz

$$N_l^{|m|} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \frac{2l+1}{4\pi}}$$

Sferik funksiyani ortonormallik shartini quyidagicha yoziladi

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l_1, m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{l_2, m_2}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}$$

II.2. Vodorod atomi. Radial tenglamani echimi

Kulon maydoni uchun (52) radial tenglamani quyidagicha yozish mumkin

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{Ze^2}{r} R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} R(r) = E R(r) \quad (70)$$

Bu tenglamani energiya E ning quyidagi diskret qiymatlarida analitik echimi mavjud ekan

$$E_n = -\frac{Z^2 \text{Ry}}{n^2}, \quad n=1,2,3,4,\dots > l+1, \quad \text{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \quad (71)$$

va uning ko‘rinishi (a - Bor radiusi)

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{Zr}{a} \right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na} \right), \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (72)$$

Agar $2Zr/na = x$ deb olsak, Lagerr polinomini quyidagicha aniqlash mumkin

$$L_{n+l}^{2l+1}(x) = \frac{d^{2l+1}}{dx^{2l+1}} \left[e^x \frac{d^{n+l}}{dx^{n+l}} (e^{-x} x^{n+l}) \right] \quad (73)$$

N_{nl} koeffitsientni radial funksiya uchun (57) normallashtirish shartidan aniqlash mumkin. Natijaviy radial funksiya ko‘rinishi

$$R_{nl}(r) = \frac{2^{l+1}}{n^{l+2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \left(\frac{Zr}{a} \right)^l e^{-\frac{Zr}{na}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na} \right) \quad (74)$$

$$n=1,2,3,\dots, \quad l=0,1,2,\dots,n-1, \quad -l, -l+1, \dots, m, 0, 1, \dots, l \Rightarrow m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Quyida to‘la to‘lqin funksiya $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ ning $n=1,2 \quad l=0,1 \quad m=0, \pm 1$ xolatlar uchun yaqqol ko‘rinishini keltiramiz

$$\psi_{1,0,0} = \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a}} \quad (75a)$$

$$\psi_{2,0,0} = \psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a} \right) e^{-\frac{Zr}{2a}} \quad (75b)$$

$$\psi_{2,1,0} = \psi_{2pz} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a}\right) e^{-\frac{Zr}{2a}} \cos\theta \quad (75c)$$

$$\psi_{2,1,1} = \psi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a}\right) e^{-\frac{Zr}{2a}} \sin\theta \cos\varphi \quad (75d)$$

$$\psi_{2,1,-1} = \psi_{2py} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a}\right) e^{-\frac{Zr}{2a}} \sin\theta \sin\varphi \quad (75e)$$

II.3. Cheksiz chuqur sferik o'ra

Sferik simmetrik cheksiz chuqur o'rani, agar energiyani sanoq boshi o'ra tubidan xisoblansa - cheksiz baland barer, to'siq deyish mumkin. Potensial energiya funksiyasi

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{if } r \leq R \\ \infty, & \text{if } r > R \end{cases} \quad (76)$$

Zarracha faqat sfera ichida xarakatlanib tashqarida to'lqin funksiya nolga teng. Sfera ichida radial tenglama

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (77)$$

Bu tenglama analitik ko‘rinishda echiladi va uni echimini Besselning butun l indeksli sferik funksiyalari orqali ifodalanadi

$$R_l(r) = A j_l(kr) \quad (78)$$

$j_l(\xi)$ funksiya Besselning yarim butun indeksli $J_{l+1/2}(\xi)$ funksiyalari orqali quydagicha bog‘langan ($\xi = kr$)

$$j_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} J_{l+1/2}(\xi)$$

$j_l(\xi)$ funksiyani dastlabki bir nechtasini keltiramiz

$$j_0(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}, \quad j_1(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi^2} - \frac{\cos \xi}{\xi}, \quad j_2(\xi) = \left(\frac{3}{\xi^3} - \frac{1}{\xi} \right) \sin \xi - \frac{3}{\xi^2} \cos \xi$$

To‘la to‘lqin funksiya

$$\psi_{k,lm}(r, \theta, \varphi) = A j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (79)$$

Burchak funksiya $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (67) da aniqlangan. CHegaraviy shartdan k ni, ya’ni energiyani diskret qiymatlarini topish mumkin

$$j_l(kR) = 0 \quad (80)$$

Agar Besselning sferik funksiyalari ildizlarini X_{nl} deb belgilasak (bu erda $n=1,2,3..$ - berilgan l uchun X_{nl} ildizlarni o‘rish tartibdagi nomeri) u xolda energiya

$$k = \frac{X_{nl}}{R}, \quad E_{nl} = \frac{\hbar^2 X_{nl}^2}{2mR^2} \quad (81)$$

Agar $f(r) = rR(r)$ deb belgilasak, (77) quydagicha ko‘rinishga keladi.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] f_l(r) = 0 \quad (82)$$

Xolatlar	n, l	X _{nl}
1s	1, 0	3.14 2
1p	1, 1	4.49 3
1d	1, 2	5.76 3
2s	2, 0	6.28 3
1f	1, 3	6.98 8
2p	2, 1	7.72 5

Masalan, $(l=0)^s$ xolat uchun

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] f_0(r) = 0 \quad (83)$$

Buni umumiy echimi

$$f_0(r) = A \sin kr + B \cos kr \quad (84)$$

yoki

$$R_0(r) = A \frac{\sin kr}{r} + B \frac{\cos kr}{r} \quad (85)$$

$r = 0$ da $R_0(0)$ funksiya cheklilik shartidan $B = 0$ kelib chiqadi. Demak

$$R_0(r) = A \frac{\sin kr}{r} \quad (86)$$

Sfera chegarasida $R_0(R) = 0$ yoki $\sin kR = \sin X_{n0} = 0$. Buni ildizlari jadvalda keltirilgan $1s, 2s$ (1,0)(2,0) $X_{10} = 3.142$, $X_{20} = 6.283$.

II.4. CHekli sferik o‘ra

Potensial energiya funksiyasi

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{if } r \leq R \\ V_0, & \text{if } r > R \end{cases} \quad (87)$$

Radial tenglamani faqat $l = 0$ ya’ni s xolat uchun yozamiz. Sfera ichida

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_I(r)}{\partial r} \right) + k^2 R_I(r) = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (88)$$

tashqarisida esa

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_{II}(r)}{\partial r} \right) - \chi^2 R_{II}(r) = 0, \quad \chi^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}, \quad V_0 > E \quad (89)$$

Bularning $r = 0$ da chekli bo'ladigan echimlari quyidagicha

$$R_I(r) = A \frac{\sin kr}{r}, \quad R_{II}(r) = B \frac{e^{-\chi r}}{r} \quad (90)$$

Bular $r = R$ chegarada quyidagi shartlarni qanoatlantirishi zarur

$$R_I(r) = R_{II}(r) \Big|_{r=R}, \quad \frac{dR_I(r)}{dr} = \frac{dR_{II}(r)}{dr} \Big|_{r=R} \quad (91)$$

(90) ni (91) ga qo'yib, ikkita tenglama olinadi. Ularni birini ikkinchisiga nisbatidan

$$kR \cot kR = -\chi R \quad (92)$$

kelib chiqadi. Endi, (88) va (89) dan k va χ ifodasidan foydalansak

$$\frac{E}{E_0} \cot \sqrt{\frac{E}{E_0}} = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E_0}}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \quad (93)$$

Agar $\varepsilon = E/E_0$, $u_0 = V_0/E_0$ deb belgilansa

$$\cot \sqrt{\varepsilon} = -\sqrt{\frac{u_0 - \varepsilon}{\varepsilon}}, \quad u_0 > \varepsilon \quad (94)$$

Bu tenglamani ildizlari o'sib borish tartibida $1s, 2s, 3s, \dots$ satxlar energiyalarini topishga imkon beradi. Endi, faqat bitta satx mavjud bo'la oladigan sayoz o'ra uchun kritik chuqurlik u_c qiymatini taxlil qilaylik. Buning uchun (94) da $u_0 \approx \varepsilon$ desak,

$$\cot \sqrt{\varepsilon} \approx \cot \sqrt{u_c} \approx 0, \quad \sqrt{u_c} \approx \frac{\pi}{2}, \quad u_c \approx \frac{\pi^2}{4} = 2.467$$

Demak potensial to'siq qiymati

$$V_0 < V_c = u_c E_0 = \frac{\pi^2}{4} \cdot \frac{\hbar^2}{2mR^2}$$

bo'lganda zarracha o'rada bog'lana olmas ekan.

Maple da (94) tenglamani sonli taxlil qilib ko'raylik. Buning uchun $x = \varepsilon / u_0$ desak,

$$\cot \sqrt{u_0 x} = -\sqrt{\frac{1-x}{x}}, \quad x < 1$$

Shu holatda kelib chiqadi.

```

> restart; evalf(Pi^2/4);
2.467401101
> t:=cot(sqrt(u0*x))=-sqrt((1-x)/x);

$$t := \cot(\sqrt{u_0 x}) = -\sqrt{\frac{1-x}{x}}$$

> x:=0.5: print( x, fsolve(t,u0) );
.5, 11.10330495
> x:=0.8: print( x, fsolve(t,u0) );
.8, 5.173702660
> x:=0.9999: print( x, fsolve(t,u0) );
.9999, 2.499167471
> x:=0.999999999999: print( x, fsolve(t,u0) );
.999999999999, 2.467401100

```

II.5.Simmetrik va anti simmetrik to'liqin funksiyalar

Biz dastlabki paragraflarda SHredinger tenglamasi analitik xolda echiladigan sodda misollarni ba'zilarini ko'rib o'tdik. Elektronlar soni bittadan ko'p bo'lgan atomlar, molekulalar va boshqa real ob'ektlar borki, bu xollarda SHredinger tenglamasini faqat taqribiy usullarda echish mumkin, ya'ni Gamiltonianni xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalari taqribiy topiladi.

Kvant mexanikasi masalalarini echishning taqribiy usullariga – g'alayonlanish nazariyasi, variatsion, matritsalar, Griin funksiyasi, kanonik almashtirishlar va boshqa qator usullarni kiritish mumkin. Quyida biz variatsion usulni sodda masalalarda bayon qilib o'tamiz. Umuman olganda bu

usuldan murakkab atomlar, molekular va fizikaning boshqa muxim masalalarini taxlil qilishda xam keng foydalaniladi.

Gamiltonianni dastlabki xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalarini taqribiy topishning variatsion usuli – g‘alayonlanish nazariyasidagi kabi “kichik parametr” zarurligini yoki qo‘shimcha soddaroq masalani spektrini (ya’ni, xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalarini) bilishni talab qilmaydi.

Qator xollarda, kvantlangan sistemaning dastlabki bir necha diskret energiyalari va ularga mos to‘lqin funksiyalarini variatsion usulda taqribiy topish mumkin bo‘ladi.

Faraz qilaylik, biror V potensial maydon berilgan va bu maydonda m massali mikrozararchani dastlabki bir necha diskret energiyalari va ularga mos to‘lqin funksiyalarini topish talab qilinsin. SHredinger tenglamasini qisqacha quyidagicha yozish mumkin

$$H\psi = E\psi, \quad H = K + V, \quad \psi = \psi_n = ?, \quad E = E_n = ? \quad (95)$$

bu erda, H to‘la energiya operatori yoki gamiltonian deyiladi, u o‘zini o‘ng tomonidagi ψ funksiyaga ta’sir etadi. Agar (95) ni chap tomonidan ψ^* ga ko‘paytirib, qaralayotgan masalani butun fazosi bo‘yicha integrallasak quyidagini topish mumkin

$$\int \psi^* H \psi d\tau = E \int \psi^* \psi d\tau \quad \text{yoki} \quad E = \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \quad (96)$$

Ushbu masalani asosiy (quyi) xolat energiyasini variatsion xisoblash uchun (isbotsiz keltiriamiz)

$$\min J_0^{\text{Var}} = \frac{\int \psi_0^* H \psi_0 d\tau}{\int \psi_0^* \psi_0 d\tau} \quad (97)$$

ifodani xisoblash kerak, ya'ni o'ng tomondagi ifodani xisoblab, uni minimumini qidirish kerak. Biroq, xali bizga asosiy xolat to'liq funksiyasi ψ_0 noma'lum. Uning ko'rinishi odatda konstruksiya qilinadi. Konstruksiya qilinayotgan ψ_0 funksiyani – sinov funksiyasi deyiladi. Bunda, qaralayotgan sistema xaqidagi barcha ma'lumotlarga tayanish kerak, uni tanlashda muallifning ushbu funksiya xaqidagi tasavvuri, to'g'rirog'i fizikaviy va matematik intuitsiyasi katta rol o'ynaydi.

Agar tanlangan ψ_0 funksiya qaralayotgan masalani aniq echimi bo'lsa, u xolda, (96,97) ga ko'ra, $J_0^{Var} \equiv E_0^{exact}$ (exact - aniq). Agar tanlangan ψ_0 taqribiy bo'lsa, u xolda $J_0^{Var} > E_0^{exact}$, ya'ni (97) minimum aniq echimdan tepada yotadi.

Odatda, sinov funksiyasi ψ_0 ni konstruksiya qilishda unda bir necha $\alpha, \beta, \gamma \dots$ qo'shimcha parametrlar kiritiladi (ularni variatsion parametrlar deyiladi). U xolda,

$$\min J_0^{Var} \{\alpha, \beta, \gamma \dots\} = \frac{\int \psi_0^*(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) H \psi_0(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) d\tau}{\int \psi_0^*(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) \psi_0(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) d\tau} \quad (98)$$

$J_0^{Var} \{\alpha, \beta, \gamma \dots\}$ ifodani $\alpha, \beta, \gamma \dots$ bo'yicha funksional deyiladi. Matematik analizdan bizga ma'lumki, (98) funksionalni $\alpha, \beta, \gamma \dots$ bo'yicha minimumini topish uchun quyidagi tenglamalardan foydalanish kerak

$$\frac{\partial J_0^{Var}}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial J_0^{Var}}{\partial \beta} = 0, \quad \frac{\partial J_0^{Var}}{\partial \gamma} = 0 \dots$$

Agar tanlanayotgan funksiya normallashtirilgan bo'lsa, u xolda (98) ni quyidagi masalaga almashtirish mumkin

$$\min J_0^{Var} \{\alpha, \beta, \gamma \dots\} = \int \psi_0^*(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) H \psi_0(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) d\tau \quad (99)$$

$$\int \psi_0^*(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) \psi_0(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) d\tau = 1 \quad (100)$$

Keyingi yuqori satxlarni xisoblashda normallashtirish va ortogonallik shartlaridan foydalaniladi. Masalan, birinchi uygʻongan satxni energiyasi $J_1^{Var} \{\alpha, \beta, \gamma \dots\}$ ni variatsion baxolash uchun, unga mos sinov funksiyasi $\psi_1(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots)$ ni asosiy xolat toʻlqin funksiyasi $\psi_0(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots)$ ga ortogonal qilib olish lozim

$$\min J_1^{Var} \{\alpha', \beta', \gamma' \dots\} = \int \psi_1^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) H \psi_1(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) d\tau \quad (101)$$

$$\int \psi_1^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) \psi_1(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) d\tau = 1 \quad (102)$$

$$\int \psi_1^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) \psi_0(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) d\tau = 0 \quad (103)$$

ya'ni, $\psi_1(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots)$ oʻziga normallashtirilgan, qoʻshnisiga esa ortogonal. Xuddi shuningdek, ikkinchi uygʻongan satxni xisoblash quyidagi variatsion masalani echishga keltiriladi

$$\min J_2^{Var} \{\alpha', \beta', \gamma' \dots\} = \int \psi_2^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) H \psi_2(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) d\tau \quad (104)$$

$$\int \psi_2^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) \psi_2(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) d\tau = 1 \quad (105)$$

$$\int \psi_2^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) \psi_1(x, y, z, \alpha, \beta, \gamma \dots) d\tau = 0 \quad (106)$$

$$\int \psi_2^*(x, y, z, \alpha', \beta', \gamma' \dots) \psi_0(x, y, z, \dots) d\tau = 0 \quad (107)$$

II.6. Geliysimon atomlarning asosiy xolati.

Ikkita elektronni - zaryadi Ze bo'lgan yadro atrofida xarakatini (bog'langan xolatini) qarab chiqamiz. Bunday sistemalarga:

vodorod manfiy ioni H^- ($Z=1$) (vodorod atomiga yana bitta elektron qo'shilgan),

geliyning neytral atomi He ($Z=2$),

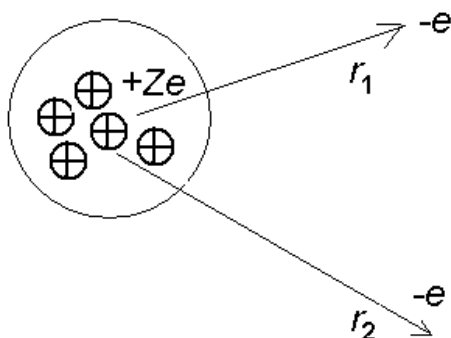
bir karra ionlashgan (bitta elektroni uzib olingan) litiy atomi Li^+ ($Z=3$),

ikki karra ionlashgan (ikkita elektroni uzib olingan) berilliy atomi Be^{++} ($Z=4$),

uch karra ionlashgan (uchta elektroni uzib olingan) bor atomi B^{+++} ($Z=5$),

to'rt karra ionlashgan (to'rtta elektroni uzib olingan) uglerod atomi C^{++++} ($Z=6$)

va xokazo ko'pgina misollarni keltirish mumkin. Bunday ikki elektronli sistemalarni – geliysimon atomlar deb atashadi.



Гелийсимон атомлар

Bu sistema uchun gamiltonian quydagicha yoziladi

$$H = H_0(1,2) + V_{12}, \quad H\psi(r_1, r_2) = E\psi(r_1, r_2) \quad (107)$$

bu erda

$$H_0(1,2) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) \quad (108)$$

ikki elektronni zaryadi Ze bo'lgan kulon maydonidagi gamilton operatori,

$$V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}, \quad r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \quad (109)$$

esa, ikki elektronni o'zaro kulon itarishuv potensial energiyasi operatori.

SHredinger tenglamasi (107) ni sodda analitik echimi mavjud emas. Uni taqribiy usullarda echiladi. Quyida eng sodda taqribiy usullardan biri g'alayonlanish usuli ni tadbiq qilishdan boshlaymiz.

III. Fazoviy kvantlanish prinsipi. Fazoviy kvantlanuvchi tuzilmalar

III .1. Ikki o'lchamli elektron gaz.

Mahlumki, makroskopik masshtablarda va yuqori energiyalarda elektron klassik zarracha deb qaraladi. Vakuumdagi yoki istalgan biron-bir fazodagi elektron erkin elektron deb ataladi. Bunday elektronlar to'plami elektron bulut, elektron gaz deyiladi. Fazodagi erkin elektronning uchta erkinlik darajasi bor. Bunday elektron x, y, z o'qlari bo'ylab bimalol erkin xarakat qila oladi. Bunday elektron gaz ham o'z navbatida uch o'lchamli elektron gaz deb ataladi. Masshtabiga bog'liq ravishda tuzilma nolg' o'lchamli (0D) yoki uch o'lchamli (3D) hisoblanadi.

Bu yerda D-dimension —o'lcham, massiv, o'lchov, kattalik xajm so'zlarining birinchi xarfi bo'lib, uning oldidagi raqam esa tuzilma geometrik o'lchami tartibini bildiradi.

Agar bunday elektronning xarakatini biron-bir yo'nalish bo'yicha chegaralasak uning erkinlik darajasi 2 ta bo'lib qoladi, yani endi bunday elektron 2 yo'nalish (x, y) bo'yicha erkin xarakat qila oladi. Bunday elektron gaz esa ikki o'lchamli elektron gaz deb ataladi. Kvant o'ralar o'lchamlari bir yo'nalish bo'yicha bir nechta qator atom oralig'idagi masofa tartibida bo'ladi, qolgan ikki yo'nalish bo'yicha esa o'lcham makroskopik qiymatga ega bo'ladi. Bu ikki o'lchamli (2D) elektron gazdir.

Amalda ikki o'lchamli elektron gaz N-n-N tuzilmalarda va mos ravishda ikki o'lchamli kovak gazi esa R-r-R tuzilmalarda hosil qilinadi. Bunda 2D elektron (kovak) gazi tor zonali yarimo'tkazgichda joylashgan bo'ladi va u ikki tomondan keng zonali yarimo'tkazgich materiali bilan chegaralangan. Geteroo'tishlar chegarasida hosil bo'ladigan uzilishlar (ΔE_c) har ikki tomondan tor zonali yarimo'tkazgichdagi elektronlarni chegaralaydi, yahni, potentsial to'siq, devor bo'lib xizmat qiladi. 2D kovak gazi misolida ΔE_v shunday vazifani bajaradi (37-rasm).

SHunday qilib, kvant o'rada geteroo'tishlar tekisligida yotadigan x, y o'qlari bo'lib elektron erkin xarakat qila oladi. Geteroo'tishlar tekisligiga tik

bo'lgan z o'qi yo'nalishida esa elektronning xarakati chegaralangan, energiyasi kvantlangan. Bu yo'nalishda elektron energiyasi quyidagi diskret qiymatlarni qabul qiladi:

$$E_n = (hn/a)^2 / 2m \quad (110)$$

Bu yerda $n=1,2,3,\dots$, m -elektronning effektiv massasi, a -kvant o'ra kengligi, tor zonali yarimo'tkazgich qatlami qalinligi. Bu yerda shu narsani takrorlashni istar edikki, kvant o'raning chuqurligi real geteroo'tishlarda ΔE_c potentsial to'siqning balandligi bilan aniqlanadi. Kvant o'raning geometrik o'lchami, jumladan, kengligi tor zonali yarimo'tkazgichning qalinligi bilan aniqlanadi. Agar bu qalinlik mahlum bir o'lchamdan katta bo'lib ketsa, u yerda kvant o'ra hosil bo'lmaydi. Bu holda elektron uch o'lchamli erkin elektron bo'lib hisoblanadi.

Nazariy hisoblashlarda potentsial o'raning chuqurligi cheksiz deb qaraladi. Amalda esa, chuqurlik ΔE_c va ΔE_v lar bilan aniqlanadi. Bundan va (110) formuladan shu narsa ayon bo'ladiki, potentsial o'ra kengligi – tor zonali yarimo'tkazgichning qalinligi bir necha nanoietr tartibida bo'ladi.

Kvant o'radagi elektronning to'liq energiyasi diskret – uzluksiz spektrga ega bo'ladi:

$$E = E_n + (P_x^2 + P_y^2) / 2m \quad (111)$$

Bu yerda P_x , P_y -elektron impulsining x , y o'qlari yo'nalishlaridagi tashkil etuvchilari.

III .2. Bir o'lchovli elektron gazli tuzilmalar. Kvantlovchi iplar.

Agar erkin elektronning xarakatini 2 yo'nalish bo'yicha chegaralasak, endi u faqat bir yo'nalish bo'yicha erkin xarakat qila oladi va uning erkinlik

darajasi 1 ga teng bo'ladi. Mos ravishda bunday elektron gaz 1 o'lchamli elektron gaz deyiladi. Bunday tuzilmalar kvant simlar (KS) yoki kvant iplar (KI) deb ataladi. Bunda o'lchamlar ikki yo'nalish bo'yicha bir necha atomlar orasidagi masofaga teng bo'ladi. Uchinchi yo'nalish bo'ylab esa o'lcham makroskopik qiymatga ega bo'ladi. Bu yo'nalish bo'yicha bir o'lchamli (1D) elektron gaz xarakat qiladi. Kvant iplarda (y, z) yo'nalishlarda elektronlarning xarakati chegaralangan, mos ravishda kvantlangan va energiya diskret qiymatlarga ega (48-ifoda). x-o'qi bo'ylab elektron erkin xarakat qila oladi. SHunday qilib, KI bo'ylab xarakatlanayotgan elektronning to'liq energiyasi ham diskret – uzluksiz spektrga ega bo'ladi:

$$E = E_{nm} + P_x^2 / 2m \quad (112)$$

Pastdan – erning sirti, maysazor bilan chegaralangan. YUqoridan esa uning xarakatini erning tortishish maydoni hosil qilgan potensial to'siq chegaralaydi. U uchib keta olmaydi. “Osmon yiroq, er qattiq”. SHunday qilib, amalda uning xarakati ikki o'lchamli bo'ladi.

Agar futbolchining xarakatini yana ikki yon tomondan to'siqlar bilan chegaralasak, uning xarakati bir o'lchamli bo'lib qoladi. Endi futbolchi faqat darvozadan darvoza tomon chiziq bo'ylab xarakat qila oladi

Kvantlashgan o'radada zarra ikki yo'nalish bo'yicha harakatlana oladi. SHu sababdan kvantlashgan o'rani ikki o'lchamli tok tashuvchilar 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 kesimli kvantlashgan ip. Bunday holda elektronlarning holat funksiyasi

$$\psi(\chi) = (1/\sqrt{L}) e^{iqz} \varphi(x, y), \quad \varphi(x, y) = \varphi_{v_x}(x, a_x) \varphi_{v_y}(y, a_y),$$

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

$$\varphi_v(x, a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{cases} \cos \frac{v_x}{a} & \text{vning juft biiymatlari uchun,} \\ \sin \frac{v_x}{a} & \text{vning toq biiymatlari uchun} \end{cases} \quad (113)$$

v_x va v_y tartib raqamli zonachalarning q to‘lqin vektorli holatidagi elektronning energiyasi

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[q^2 + \left(\frac{v_x \pi}{a_x} \right)^2 + \left(\frac{v_y \pi}{a_y} \right)^2 \right]. \quad (114)$$

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

$$\psi(\chi) = \varphi_{v_x}(x, a_x) \varphi_{v_y}(y, a_y) \varphi_{v_z}(z, a_z), \quad E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_A} \sum_{j=x,y,z} \left(\frac{v_j}{a_j} \right)^2 \quad (115)$$

munosabatlar yordamida aniqlanadi.

Endi chekli balandlikli R radiusli sferaviy kvantlashgan nuqtada elektronning asosiy holati ($q=0$) to‘g‘risida fikr yuritaylik. Bunday tizimda asosiy holat funksiyasi simmetriyaviy bo‘lib, uning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\psi(\chi) = Cr^{-1} \begin{cases} \sin kr & r \leq R, \\ \sin k R e^{-\kappa(r-R)} & r \geq R, \end{cases} \quad (116)$$

S-normirovkalanganlik koefitsienti,

$$k = (2m_A E / \hbar^2)^{1/2}, \quad \kappa = [2m_B (V - E) / \hbar^2]^{1/2}. \quad (117)$$

Bunday kvantlashgan nuqtadagi elektronning energiyaviy spektri

$$1 - kR \operatorname{ctg} kR = \frac{m_A}{m_B} (1 + \aleph R).$$

munosabatni qanoatlantiradi.

Endi esa chekli balandlikli silindrik kvantlashgan ipda elektronning asosiy holati ($q=0$) to'g'risidagi mulohazalarni keltiraylik. Bunday tizimlarda holat funksiyalar $J_0(x)$ va $K_0(x)$ Bessel funksiyalari yordamida ifodalanadi:

$$\psi(\chi) = \begin{cases} CJ_0(k\rho) & r \leq R, \\ DK_0(\aleph\rho) & r \geq R, \end{cases} \quad (117)$$

bu erda $D = CJ_0(kR)/K_0(\aleph R)$.

Holatlarning energiyaviy zichligi. $d=3,2,1,0$ o'lchamli fazoda kvazizarralarning $E_{n\vec{k}}$ energiyaviy spektrini tahlil etaylik, n -diskret qiymatli kvant soni, $\vec{k}$ - d komponentali (tashkil etuvchili) to'liqin vektori. Nol o'lchamli tizimlarda to'liqin vektori fizikaviy mo'iyatini yo'qotib, kvantsoniga aylanib qoladi. Biroq bu kvant soni kvant mexanikasi fanidagi kvant sonlaridan farqli o'laroq, o'lchamli kvantlashish holatlariga taaluqlidir.

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

$$g_d(E) = \frac{2}{V_d} \sum_{nk} \delta(E - E_{nk}), \quad (118)$$

ko'rinishda qayd qilish mumkin. Bu munosabatdagi 2 raqami elektronli holatlarning spiniga 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 $E_{n\vec{k}}$ energiyani $\vec{k}$ to'liqin vektoriga nisbatan qatorga yoyib va kvadratik hadlar bilangina

chegaralansak, u holda $E_{n\vec{k}} = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_n}$ ifodani olamiz va unda M_n -massa birligidagi kattalik bo'lib, u m_A va m_B qiymatlarni qabul qilishi mumkin. Bu qatorni (156) ifodada e'tiborga olsak, u holda holatlar zichligiga n tartib raqamli tarmog'ining ulushi uchun munosabatni olamiz

$$g_3(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2M_n}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \theta(E - E_n^0), \quad (119)$$

$$g_2(E) = \frac{M_n}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_n^0), \quad (120)$$

$$g_1(E) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2M_n}{\hbar^2 E} \right)^{1/2} \theta(E - E_n^0), \quad (121)$$

$$g_0(E) = 2\delta(E - E_n^0), \quad (122)$$

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

III.3. Nol o'lchamli elektron gaz. Kvant nuqtalar

Agarda elektronning xarakatini uchchala yo'nalish bo'yicha chegaralasaq, endi u xech bir yo'nalish bo'yicha erkin xarakatlana olmaydi. Uning erkinlik darajasi nolga teng bo'ladi. Mos ravishda bunday elektronlar nol o'lchamli elektron gaz deb ataladi. Amalda esa bu bog'langan elektrondir. Yoki kvantomexanik ibora bilan aytganda esa uch o'lchamli potensial o'ra ichidagi elektrondir. Bunday tuzilmalar kvant nuqtalar (KN) deb ataladi. KNlarning o'lchamlari mavjud uch yo'nalish bo'yicha atomlar orasidagi masofa tartibida bo'ladi. Bunday tuzilmalarda uchchala (x , y , z) yo'nalishlarda ham masofalar juda kichik. SHuning uchun uchchala yo'nalishda ham elektronning energiyasi kvantlangan va ular (123) ifoda bilan aniqlanadi. KNlar haqiqiy chuqurliklari (ΔE_c) va (124) ifodani inobatga olib, hisoblashlarni bajarsak, KNlarning amaldagi o'lchamlari nanometrlar tartibida

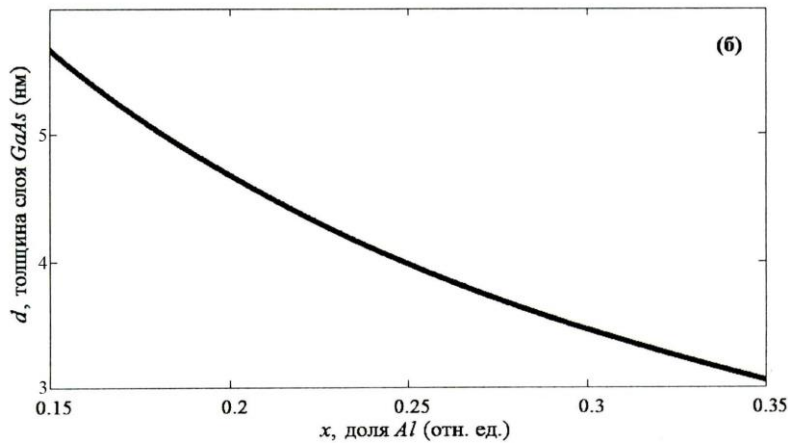
bo'lishini topamiz Kub yoki sfera shaklidagi kvant nuqtalarning minimal va maksimal o'lchamlari quyidagicha aniqlanadi.

Odatda, kvant nuqtaning o'lchami kichrayib borgani sari undagi diskret sathlar soni kamayib boradi. Berilgan ΔE_c da eng kamida bitta diskret sath qolish shartidan kvant nuqtaning minimal o'lchamlari topiladi. Ular InAs-GaAs, GaAs-AlxGa1-xAs geterotuzilmalarda tahminan teng bo'lib, $40 \text{ \AA}$ ni tashkil etadi. SHuningdek, kvant nuqtalarning o'lchamlari kattalashib borgani sari diskret sathlar soni ko'payib boradi va ular bir-biri bilan yaqinlashib, oralig'i kichrayib boradi. Ma'lum bir o'lchamdan katta bo'lganda, bu oraliq kTga nisbatan kichik bo'lib qoladi va elektron bir sathdan ikkinchisiga bimalol o'tib keta oladi. Bunda diskretlik va kvantlanish yo'qoladi. Bu kvant nuqtaning maksimal o'lchamlarini belgilaydi. Amalda kvant nuqtaning maksimal o'lchami InAs-GaAs tizimida $200 \text{ \AA}$ ni, GaAs-AlxGa1-xAs tizimida esa $140 \text{ \AA}$ ni tashkil etadi. Kvant nuqtaning o'lchamlari bundan katta bo'lsa undagi elektronlar erkin elektronlarga aylanib qoladi.

Hozirgi paytda birinchi tur geteroo'tishli hilma-xil geterojuftliklar asosidagi kvant nuqtalar amalda tayyorlangan va o'rganilgan Ularning energetik zona diagrammalari 8-rasmdagi, 37a-rasmdagi kabi ko'rinishlarda bo'ladi.

Misol uchun, bugungi kunda model juftlikka aylangan GaAs-AlxGa1-xAs geterotizimdagi taqiqlangan zonasi katta bo'lgan AlxGa1-xAs matritsa materialida joylashgan tor zonali GaAs KNning minimal o'lchamlarini hisoblash usulini ko'rib chiqaylik. Minimal o'lchamlar deyilganda, misol uchun sferik KN uchun uning diametri, kub holida esa kubning yoqlari nazarda tutiladi. Albatta, GaAs KNning minimal o'lchamlari AlxGa1-xAs matritsa materiali taqiqlangan zonasining kengligiga yoki boshqacha aytganda AlxGa1-xAs qattiq aralashma tarkibidagi Al miqdoriga, demak, x ga bog'liq bo'ladi. Bunga sabab ΔE_c ning qiymati x ga bog'liq bo'ladi (15-rasm).

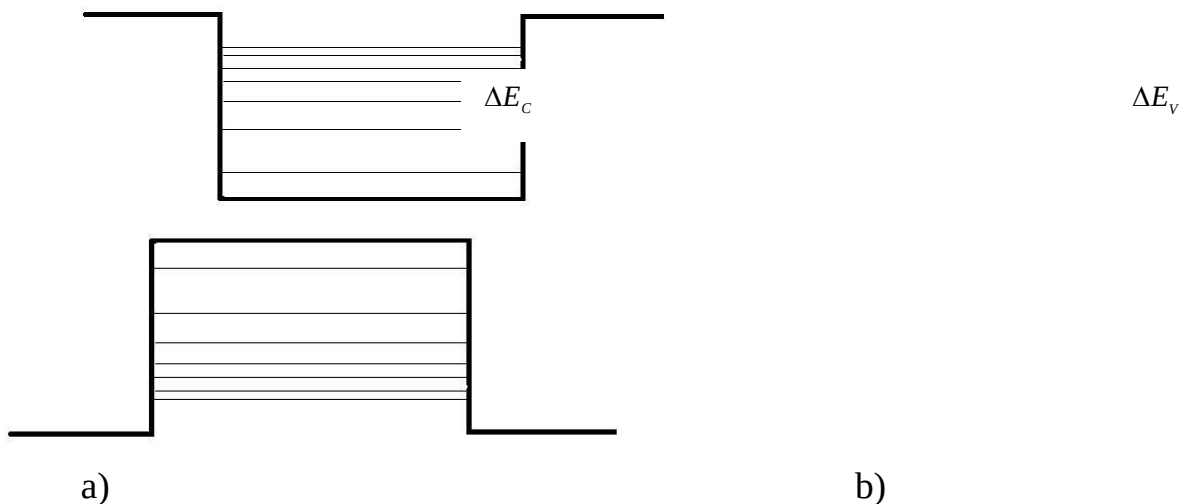
SHakldan (15-rasm) x ning xar bir qiymati uchun ΔE_c ni aniqlab olamiz. KTning minimal o'lchamida $U = \Delta E_c$ ekanligini inobatga olib, 48-ifodadan KTning minimal geometrik o'lchamlarini hisoblab topamiz.



38-rasm. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ matritsadagi GaAs KN minimal o'lchamlarining qattiq qotishma tarkibiga – x ga bog'liqligi.

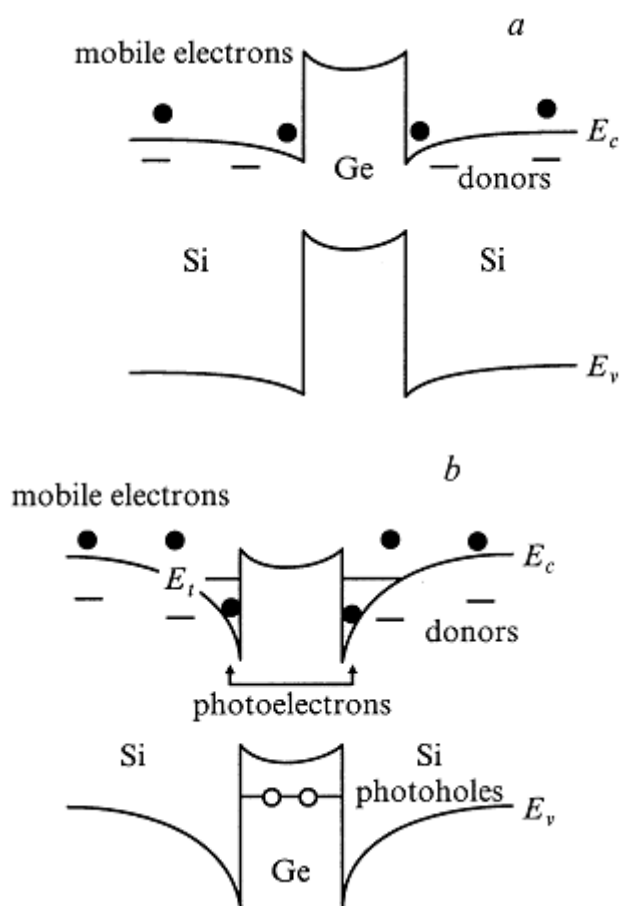
KNlarni ulkan sun'iy diskret atomlar deb qarash ham mumkin. Bunday ulkan atomdagi elektronlarning soni juda katta bo'lishi mumkin va u o'z spektrlariga ega. Bunday spektrlarning mavjudligi fotolyuminesensiya va elektrolyuminesensiya tajribalarida tasdiqlangan.

Ta'kidlash joizki bunday ulkan sun'iy atomlar elektronli (39a-rasm) yoki kovakli (39b-rasm) bo'lishi mumkin.



39-rasm. a) n-turli materialdagi elektronlar uchun KNning ko'rinishi; b) r-turli materiallardagi elektronlar uchun KNning ko'rinishi

O'z navbatida KN I-tur geteroo'tishlar asosida yoki II-tur geteroo'tishlar asosida hosil qilinishi mumkin. KNlar I-tur geteroo'tishlar asosida hosil qilinganda 39a-rasm va 39b-rasmdagi zona energetik diagrammalari ustma-ust tushadi va bir paytning uzida elektronlar va kovaklar uchun kN xosil buladi KN chuqurligi ΔE_c va ΔE_v qiymatlarga bog'liq bo'ladi. Agar ularning bittasi juda kichik bo'lsa, o'sha turdagi tok tashuvchilar uchun KN hosil bo'lmaydi. Misol uchun GaAs-AlxGa1-xAs tizimida ΔE_v juda kichik bo'ladi va mos ravishda yuqori temperaturalarda kovaklar uchun KN hosil bo'lmaydi.



40-rasm. II-tur geteroo'tishlar asosidagi KNning qorong'ulikdagi (a) va yoritilganlikdagi (b) zona energetik diagrammasi.

KN II-tur geteroo'tishlar asosida hosil qilinganda o'ziga hos xususiyatlarga ega bo'ladi. Misol uchun Ge/Si, ZnSe/BeTe, InAsSb/AlSb geterojuftliklar asosida KN hosil qilinganda valent zonada kovaklar uchun KN hosil bo'ladi, lekin elektronlar KN atrofida joylashgan bo'ladi 40-rasm.

Albatta, bu elektronlarning energiyasi ham kvantlangan. Bu holda elektronlar taqiqlangan zonasi katta bo'lgan yarimo'tkazgichda (matritsa materialida), kovaklar esa tor zonali yarimo'tkazgichda joylashgan bo'ladi va shunday qilib, ular fazoviy ajratilgan bo'ladi.

Aytilganlarni quyidagi fikran o'tkazilgan tajribada yaqqolroq tasavvur qilish mumkin. Futbolchi futbol maydonida darvozadan darvozagacha chopar ekan, u ikki o'lchamli elektron gazni, ikki o'lchamli elektronni eslatadi. Aslida, u uch o'lchamli bo'lishi kerak edi. Lekin uning xarakati ikki tomondan – pastdan va yuqoridan chegaralangan. holos, yon tomonlarga harakat chegaralangan. Bu esa bir o'lchamli harakatga misol bo'la oladi.

Agar endi futbolchining xarakatini barcha tomondan chegaralasak, endi u xarakat qila olmay qoladi. Bu esa kvant nuqtaga taqqoslanishi mumkin.

SHuni nazarda tutish lozimki, kvant nuqtadagi zaryad tashuvchilarning – elektron va kovaklarning harakati, energiyasi kvantlangan bo'ladi. Faqatgina bu kvantlanish energiyasi potensial to'siqlarning balandligiga, kvant nuqtaning o'lchamlariga bog'liq bo'ladi. SHuningdek, temperatura ortishi bilan ham energetik sathlar yuqoriga ko'tarila boshlaydi. Ma'lum bir temperaturada elektron kvant nuqtani butunlay tark etadi. Endi u yana kristall ichidagi uch o'lchamli zarrachaga aylanadi.

Metallar va yarimo'tkazgichlardagi elektronlar o'z atomlarini tark etib kristall bo'ylab erkin xarakat qilib yurishlari mumkin. Lekin aslida ular kvazierkin elektronlardir. Ular faqat kristal panjara ichida erkin xarakat qilib yura oladilar, muayyan shart-sharoit bo'lmaguncha, kristalni tark eta olmaydilar. YA'ni, ular ham makroskopik masshtabdagi potensial o'ra ichidagi elektronlardir. SHunday bo'lsada, soddalik uchun bunday elektronlarni erkin elektronlar deb atash qabul qilingan. Bunday elektron gaz esa uch o'lchamli elektron gaz deb xisoblanadi.

O'lchamli kvantlanishni yarimo'tkazgichlarda namoyon qilish yuqori texnologiyalar (molekulyar nurli epitaksiya) yordamida biror taglik ustida

nafaqat kristallografik tuzilishi, balki kimyoviy tarkibi xam bir-biridan farq qiladigan o'ta yupqa qatlamlar o'stirish orqali amalga oshiriladi.

IV. Nanotuzilmalarda tok tashuvchilar statistikasi va xolatlar zichligi.

IV.1. Xolatlar zichligi

Qattiq jism zonalar nazariyasiga ko'ra, yarimo'tkazgichli geterostruktura asosidagi kvazi ikki o'lchovli o'rada elektron (kovak) ni to'liq funktsiyasi va energiya spektri effektiv massa metodida SHredinger tenglamasini echib topiladi [. Bunda to'liq vektori uchun quyidagi munosabatlar o'rinli

$$k^2 = k_{\perp}^2 + k_n^2, \quad k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad k_n = \frac{\pi n}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m(0)L^2} = E_1 n^2$$

(125)

Bu erda $m(0)$ - elektronni o'tkazuvchanlik zonsi tubidagi effektivnaya massasi, L - o'ra kengligi, $k_{\perp}$ - elektronni x, y tekislikdagi to'liq vektori, k_n - to'liq vektorini z komponenti. Elektron uchun noparabolik energiya spektrini quyidagicha ifodalaymiz [5]

$$\chi(E) = E(1 + \alpha E + \beta E^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m(0)} = \frac{\hbar^2 (k_{\perp}^2 + k_n^2)}{2m(0)} \quad (126)$$

Bu erda α, β - parametrlar dispersiyani noparabolik darajasini ifodalaydi. Elektronlar gazining energetik xolatlar zichligini (XZ) topish uchun to'la zarralar soni tenglamasidan foydalanamiz. Uni quyidagicha yozish mumkin

$$\begin{aligned} N &= s \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \int dk_x dk_y f(E) = s \frac{L_x L_y}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} k dk f(E) = s \frac{L_x L_y}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk_{\perp}^2 f(E) = \\ &= s \frac{L_x L_y}{4\pi} \frac{2m(0)}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} d\left(\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m(0)}\right) f(E) = \frac{L_x L_y}{\pi} \frac{m(0)}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{\partial \chi(E)}{\partial E} f(E) \Theta[\chi(E) - E_n] dE \end{aligned} \quad (127)$$

yoki

$$= \frac{L_x L_y}{\pi} \frac{m(0)}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{E_n}^{\infty} \frac{\partial \chi(E)}{\partial E} f(E) dE, \quad \bar{E}_n \in \chi(E) \geq E_n \quad (128)$$

Bu erda $f(E)$ - Fermi-Dirak taqsimot funksiyasi

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} + 1} \quad (129)$$

Elektronlar konsentratsiyasini XZ orqali ifodalaylik. (3) dan quyidagini yozish mumkin

$$n_{3D} = \frac{N}{L_x L_y L} = \frac{m(0)}{\pi \hbar^2 L} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{\partial \chi(E)}{\partial E} f(E) \Theta[\chi(E) - E_n] dE = \int_0^{\infty} N(E) f(E) dE$$

(130)

Bu erdan XZ uchun formula olish mumkin

$$N(E) = N_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial \chi(E)}{\partial E} \Theta[\chi(E) - E_n], \quad N_0 = \frac{m(0)}{\pi \hbar^2 L}$$

(131)

$$\frac{\partial \chi(E)}{\partial E} = 1 + 2\alpha E + 3\beta E^2,$$

(132)

$$N(E) = N_0 \sum_{n=1}^{\infty} (1 + 2\alpha E + 3\beta E^2) \Theta[E(1 + \alpha E + \beta E^2) - E_n]$$

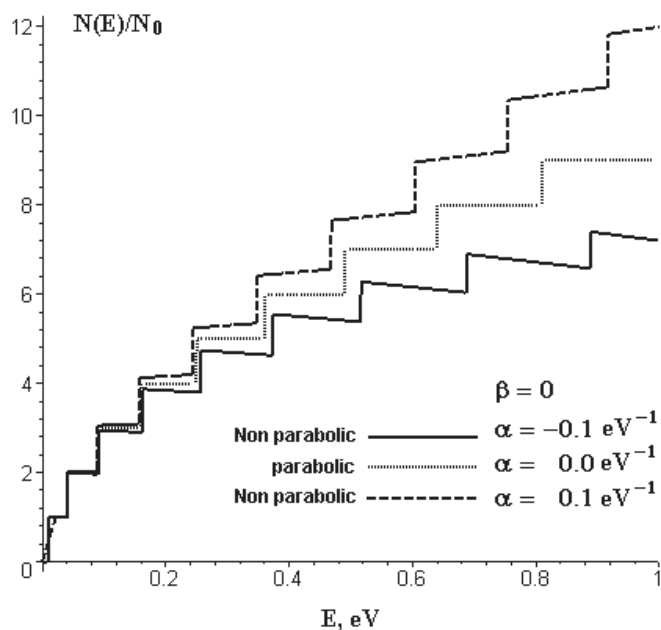
(133)

Xususan, agar $\alpha = \beta = 0$ bo'lsa, parabolik dispersiya uchun bizga ma'lum formula xosil bo'ladi

$$N(E) = N_0 \sum_{n=1}^{\infty} \Theta(E - E_n)$$

(134)

(169) formula yordamida $N(E)/N_0$ funksiyani grafigini yasaymiz: bunda $E_1 = 0.01 \text{ eV}$, $\beta = 0$, $\alpha = -0.1, 0, 0.1 \text{ eV}^{-1}$ qiymatlardan foydalanamiz.



1-rasm. XZ ni energiyaga bog‘lanishi: $E_1 = 0.01$ eV, $\beta = 0$, $\alpha = -0.1, 0, 0.1 \text{ eV}^{-1}$.

1-rasmdan ko‘rinadiki, kvazi ikki o‘lchovli elektron gazining energiya XZ spektrni noparabolik darajasiga kuchli bog‘liq ekan. Noparabolik parametr α ni manfiy qiymatlarida ikki o‘lchovli elektron gazini XZ parabolik xoldagiga gisbatan kamayar ekan. XZ o‘zgarishidagi pog‘onalar katta energiyali soxaga siljir ekan. Bunda, energiya orta borishi bilan siljish monoton kamayar ekan. Pog‘onalarni gorizonta soxalari kichik XZ tomonga og‘ar ekan, noparaboliklik darajasi qancha katta bo‘lsa – og‘ish shuncha katta bo‘ladi.

Noparabolik parametr α ni musbat qiymatlarida XZ ortishi kuchaya boradi, energiya ortishi bilan yuqoriga kuchliroq og‘adi.

Satxlarni termik kengayishi. XZ ni temperaturaga bog‘liqligi

XZ (9) ni temperaturaga bog‘lanishini topish uchun $N(E, T)$ ni Fermi-Dirak funksiyasini energiya bo‘yicha xosilasi $\partial f / \partial E$ orqali ifodalaymiz

$$N(E, T) = \int_0^{\infty} N(E', 0) \frac{\partial f(E', E, T)}{\partial E} dE' \quad (135)$$

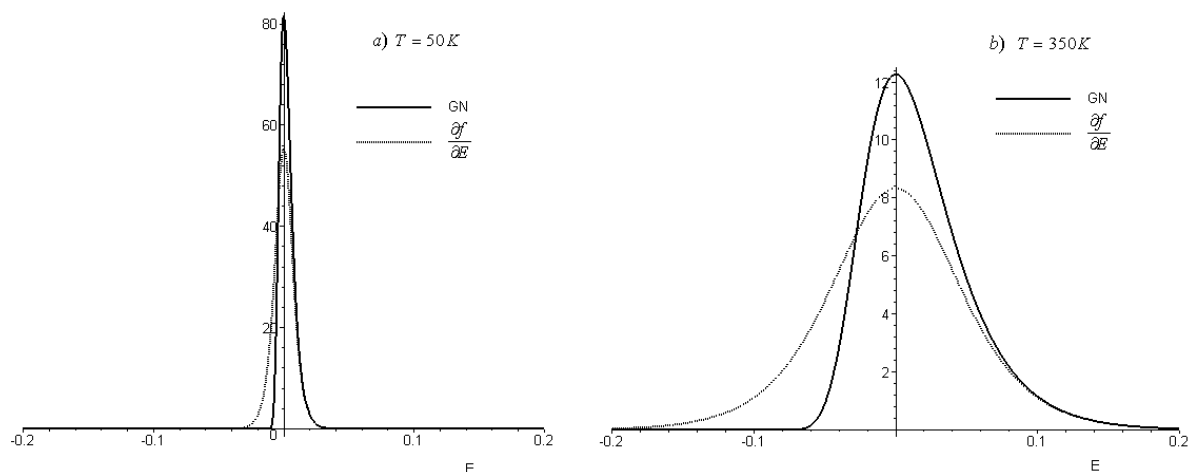
Bu erda

$$f = \frac{1}{\exp((E' - E)/T) + 1}$$

Bu formulada $f(E)$ funksiya E diskret satxni to'ldirilish extimolini ifodalaydi. Termodinamik muvozanat vaziyatida $f(E)$ funksiya Fermi-Dirak funksiyasiga mos keladi. Nomuvozanatli sharoitlarda $f(E)$ funksiya ko'rinishi SHokli-Rid-Xoll statistikasi orqali aniqlanadi va $\partial f / \partial E$ ifoda o'rniga GN funksiya mos keladi [3,4]

$$N(E, T) = \int_0^{\infty} N(E', 0) GN(E', E, T) dE', \quad GN(E', E, T) = \frac{1}{T} \exp \left[\frac{E' - E}{T} - \exp \left(\frac{E' - E}{T} \right) \right] \quad (136)$$

Termodinamik muvozanatga yaqin sharoitlarda energetik satxlarni to'ldirilishi Fermi-Dirak funksiyasi orqali ifodalanadi. Bu funktsiyani energiya bo'yicha xosilasi $\partial f / \partial E - \mu$ atrofida simmetrik funksiyadir.



2-rasm. GN va $\partial f / \partial E$ funksiyalar grafiklari: temperatura qiymati: a) $T = 50K$, va

b) $T = 350K$

(135) ifodani (136) ga qo'yib quyidagini topamiz

$$N(E, T) = N_0 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} (1 + 2\alpha E' + 3\beta E'^2) \Theta[E'(1 + \alpha E' + \beta E'^2) - E_n] \frac{\partial f(E', E, T)}{\partial E} dE' \quad (137)$$

(13) ifodani taxlil qilish maqsadida soddalashtirilgan xol $\beta = 0$ ni qarab chiqaylik. U xolda, Xevisayd funksiyasi $\Theta[E'(1 + \alpha E') - E_n]$ integralni quyi chegarasini $\overline{E_n}$ nuqtadan chegaralaydi, bu nuqta ifodasi

$$\overline{E_n} = \frac{\sqrt{1 + 4\alpha E_n} - 1}{2\alpha}.$$

formulani quyidagicha yozib olamiz

$$N(E, T) = N_0 \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\overline{E_n}}^{\infty} (1 + 2\alpha E') \frac{\partial f(E', E, T)}{\partial E} dE' = -N_0 \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\overline{E_n}}^{\infty} (1 + 2\alpha E') \frac{\partial f(E', E, T)}{\partial E'} dE' \quad (138)$$

ni bo'laklab integrallasak ushbu natijaga kelimiz

$$\begin{aligned} \int_{\overline{E_n}}^{\infty} (1 + 2\alpha E') \frac{\partial f(E', E, T)}{\partial E'} dE' &= (1 + 2\alpha E') f(E', E, T) \Big|_{\overline{E_n}}^{\infty} - 2\alpha \int_{\overline{E_n}}^{\infty} f(E', E, T) dE' = \\ &= -(1 + 2\alpha \overline{E_n}) f(\overline{E_n}, E, T) - 2\alpha \int_{\overline{E_n}}^{\infty} f(E', E, T) dE' = -\frac{(1 + 2\alpha \overline{E_n})}{e^{\frac{\overline{E_n} - E}{T}} + 1} - 2\alpha T \ln \left(1 + e^{\frac{E - \overline{E_n}}{T}} \right) \end{aligned} \quad (139)$$

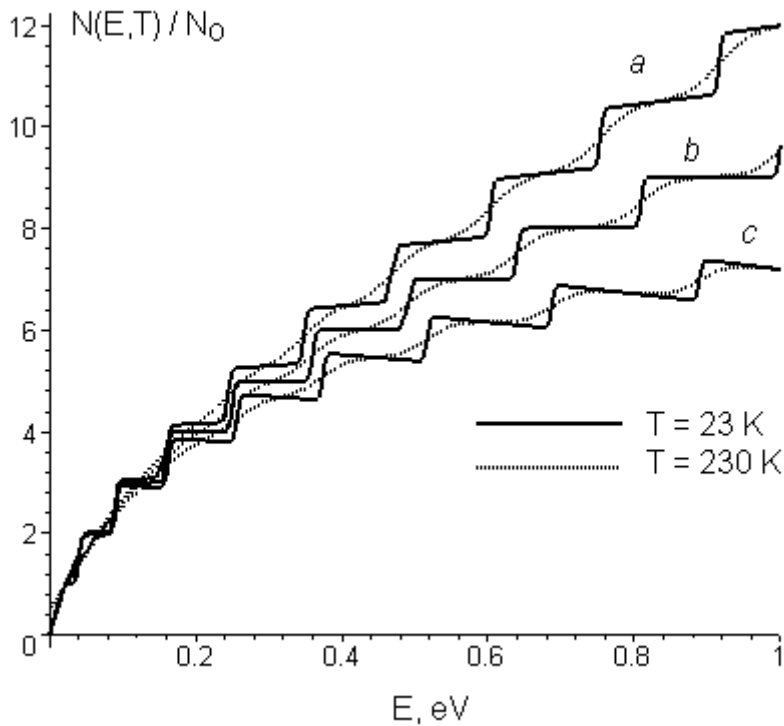
Topilgan (138) ifodani (139) ga qo'yib kutilayotgan natijaga kelimiz

$$\frac{N(E,T)}{N_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{(1+2\alpha\bar{E}_n)}{e^{\frac{\bar{E}_n-E}{T}} + 1} + 2\alpha T \ln \left(1 + e^{\frac{E-\bar{E}_n}{T}} \right) \right] \quad (140)$$

Xususiyl xolda parabolik dispersiya uchun $\alpha = 0$ (140) formula bizga ma'lum bo'lgan sodda ko'rinishga keladi

$$\frac{N(E,T)}{N_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{\bar{E}_n-E}{T}} + 1}.$$

(141) formula yordamida $N(E,T)/N_0$ funksiya grafigini yasaymiz. Bunda o'zgarmaslar uchun $E_1 = 0.01$ eV, $\alpha = -0.1, 0.001, 0.1 \text{ eV}^{-1}$ va temperatura uchun $T = 23 \text{ K}, 230 \text{ K}$ qiymatlardan foydalanamiz.

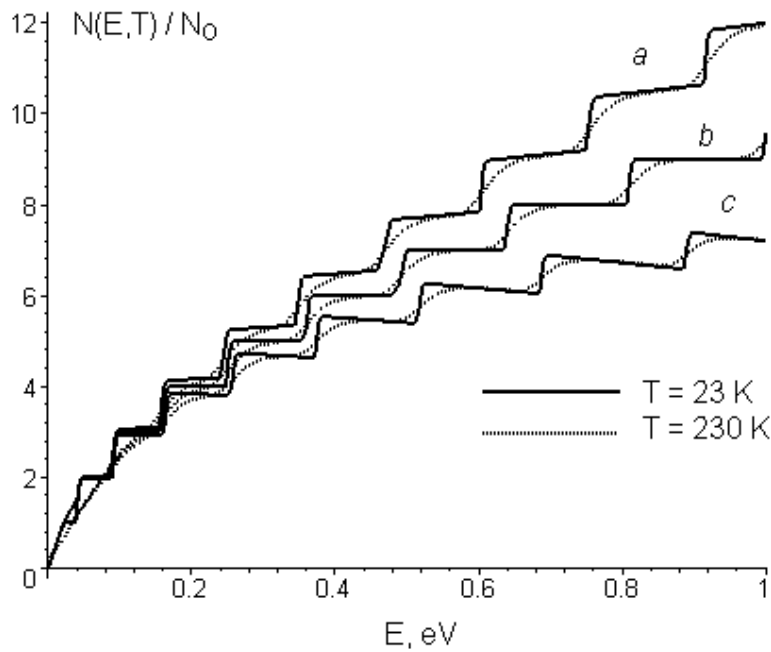


3-Rasm. Turli temperaturalarda (16) XZ ni energiyaga bog‘lanishi. $E_1 = 0.01$ eV, a) $\alpha = 0.1 \text{ eV}^{-1}$, b) $\alpha = 0.0001 \text{ eV}^{-1}$, c) $\alpha = -0.1 \text{ eV}^{-1}$ va temperaturalar $T=23$ K, $T=230$ K.

$N(E,T)/N_0$ ni GN - funksiya yordamida xisoblangan grafigini xam keltiramiz. Bunda quyidagi ifodadan foydalanishimiz mumkin

$$N(E,T) = N_0 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} (1 + 2\alpha E' + 3\beta E'^2) \Theta[E'(1 + \alpha E' + \beta E'^2) - E_n] GN(E', E, T) dE'$$

(141)



4-Rasm. Turli temperaturalarda (178) XZ ni energiyaga bog‘lanishi. $E_1 = 0.01$ eV,
a) $\alpha = 0.1 \text{ eV}^{-1}$, b) $\alpha = 0.0001 \text{ eV}^{-1}$, c) $\alpha = -0.1 \text{ eV}^{-1}$ va temperaturalar
 $T=23$ K,
 $T=230$ K.

3 va 4 –rasmlardan ko‘rinadiki, temperatura $N(E,T)$ bog‘lanishni tabiatiga kuchli ta’sir etar ekan. Termodinamik XZ ni temperaturaga bog‘lanishi – elektronlarni diskret E_n energiya satxlaridan yuqori bo‘sh satxlarga termik generatsiyasi orqali aniqlanadi. Bunda, E_n energiya satxlarini to‘ldirilish ehtimoli SHokli-Rid-Xoll statistikasi yordamida ifodalanadi

Past temperaturalarda - elektronlarni diskret E_n energiya satxlardan termik generatsiyasi kuchsizligi sababli energiya satxlarni sezilarli kengayishiga olib kelmaydi, natijada XZ keskin-pog‘onali ko‘rinishda bo‘ladi (3 ,4 –rasmlar). Bu xolda XZ ni spektrni noparabolik darajasiga bog‘liqligi ilgarigidek 1-rasm dagi ko‘rinish kabidir. Demak, past temperatur - XZ formasiga deyarli ta’sir ko‘rsatmaydi.

Temperatura orta borgan sari elektronlarni diskret E_n energiya satxlardan termik generatsiyasi kuchayadi. Bu – erengiya satxlarni kengayishi sababli termodinamik XZ ni energiyaga bog‘lanishini o‘zgarishiga olib keladi, ushbu bog‘lanish formasi keskin o‘zgaradi. 3,4-rasmlarda $T = 230K$ temperaturadagi termodinamik XZ ni bog‘lanishi keltirilgan. Bu xolda, energiya satxlarini termik kengayishi sababli XZ ni keskin-pog‘onali o‘zgarishi deyarli bartaraf etilib, uzluksiz o‘zgaruvchi silliq chiziqlarga aylangan.

Past energiyalarda pog‘onalar deyarli yo‘qolgan. Energiyani ortib borishi bilan dastlabki pog‘onalar o‘rnida kuchsiz bog‘lanish ko‘rinib turipti.

Noparaboliklik koeffitsienti ortsa, XZ chizig‘i monoton ortar ekan. 3,4-rasmlardan ko‘rinadiki, dispersiyani noparabolikligi tufayli, α ni musbat qiymatlarida XZ ni orttirar - manfiy qiymatlarida esa kamaytirar ekan.

IV.2. Nanotuzilmalarda adiabatik polyaronlar

Bugungi kundagi yarimo‘tkazgichli materiallar texnologiyasini taraqqiyoti tufayli o‘lchamlari birnecha nanometrdan iborat bo‘lgan

tuzilmalar olishga imkon beradi. Tok tashuvchilar energiyasini fazoviy kvantlanishi tufayli - kvant nuqtalar (KN) kabi tuzilmalar yangi turdagi mikroelektron asboblari yaratishda muxim ob'ekt bo'lib xizmat qiladi.

Ko'pgina yarimo'tkazgich materiallar polyar xossaga egaligi bois ulardan tayyorlanadigan kvant nuqtalardagi elektronlar yoki kovaklarni polyar-optik fononlar bilan kuchli ta'sirlashuvi ularning energiya satxlari sezilarli tuzatma berishi mumkin.

Polyaronning asosiy xolat energiyasi - Feynmanning traektoriyalar bo'yicha integrallash metodida eng aniq xisoblanadi. Bir nechta quyi xolatlar energiyasini xisoblash uchun boshqa taqribiy metodlar mavjud. Landau-Pekarning adiabatik metodini elektronni polyarizatsiya maydonida kuchli lokallashtirgan sharoitda – ya'ni KN radiusi polyarion radiusidan ancha kichik bo'lganda $R \ll l_0$ qo'llash mumkin. Agar bu shart bajarilmasa, ixtiyoriy kuchli bog'lanish metodidan foydalanish mumkin, bu metod polyarionli xolat energetik satxlarni l_0/R munosabatni ixtiyoriy qiymatlarida xisoblashga imkon beradi.

Bunday metodlardan biri – LLPH (Lee-Low-Pines-Huybrechts) [10,11] metodi bo'lib, ma'nosiga ko'ra u fononlar koordinatasini parametrlashtirilgan xolda almashtirishga asoslangan. Boshqa bir metod Buymistrov va Pekar (BP) tomonidan ishlab chiqilgan bo'lib, Gross tomonidan rivojlantirilgan [14]. Kuchli va kuchsiz elektron-fonon o'zaro ta'sirlashuv rejimida LLPH va BP metodlari polyarion energetik xolatlari uchun aniq qiymat berib, oraliq rejimda esa taqribiy natija beradi. Odatda, elektron to'liq funksiyasi KN ichida lokallashtirilganligi sababli, oraliq rejimga to'g'ri keluvchi polyarion xolat energiyasi uchun ancha aniq natija olish mumkin.

Quyida BP metodi yordamida xamda parabolik potentsial modelida polyar-optik fononlar bilan ta'sirlashuvchi elektronni asosiy $1s$ va birinchi uyg'ongan $1p$ xolat energiyasi xisoblanadi. Fononlar to'liq funksiyasini

aniqlashtirilgan ifodasi topilib, polyaronli xolatlar energiyasini ancha aniqroq baxolash mumkin ekanligi aniqlangan, xamda ushbu topilgan energiya satxlari kvant nuqtani o'lchamiga boshqa metodlar natijasiga nisbatan kuchliroq bog'lanishi ko'rsatilgan.

Model

KN ning parabolik potensial maydonida xarakatlanuvchi va polyar-optik fononlar bilan ta'sirlashuvchi elektronni Gamilton operatori quyidagicha yozish mumkin

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \sum_{\mathbf{q}} [v_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + v_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}] + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_0 b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \quad (142)$$

Bu erda, m – elektronni o'tkazuvchanlik zonasidagi massasi, $b_{\mathbf{q}}^+, b_{\mathbf{q}}$ – impulsi $\mathbf{q}$ bo'lgan fononlarni xosil qiluvchi va yo'qotuvchi operatorlar, ω_0 – optik fononlar chastotasi, $v_{\mathbf{q}}$ – elektron – fonon o'zaro ta'sir form-faktori, $V(r)$ – KN ni potensial maydoni

$$|v_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{4\pi\alpha l_0 (\hbar\omega_0)^2}{\Omega q^2}, \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}, \quad \sum_{\mathbf{q}} \dots = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \dots, \quad V(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad (143)$$

(1) gamiltonianni diogonal ko'rinishgi keltirish maqsadida quyidagi bazisdan (sinov variatsion funksiya) foydalanish mumkin

$$\Psi = \Phi_{ph} \varphi(r) = U|0\rangle \varphi(r), \quad U = \exp \left[\sum_{\mathbf{q}} (F_{\mathbf{q}}(r) b_{\mathbf{q}}^+ - F_{\mathbf{q}}^*(r) b_{\mathbf{q}}) \right], \quad U^+ U = 1, \quad \langle 0|0\rangle = 1 \quad (144)$$

U xolda (190) gamiltonianni o'rta qiymati quydagi funksionalni beradi

$$J\{F_q(r), \varphi(r)\} = E_0 + \sum_q \int d\mathbf{r} \varphi^2 \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla F_q|^2 + \hbar \omega_0 |F_q|^2 + v_q F_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + v_q^* F_q^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right] \quad (145)$$

Bu erda

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} (\nabla \varphi)^2 + \int d\mathbf{r} V(r) \varphi^2 \quad (146)$$

Noma'lum F_q funksiyani aniqlash mumkin. Buning uchun variatsion prinsipga ko'ra (4) funksionalni F_q bo'yicha variatsiyasini nolga tenglab, quyidagi bir jinsli bo'lmagan differensial tenglamani topamiz

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 F_q(r) - 2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla \varphi}{\varphi} \nabla F_q(r) + \hbar \omega_0 F_q(r) + v_q^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = 0 \quad (147)$$

Endi (4) funksionalni ekstremal qiymati quyidagiga teng bo'ladi

$$J\{\varphi(r)\} = E_0 + \sum_q v_q \int d\mathbf{r} \varphi^2(r) F_q(r) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (148)$$

Polyaron energiyasini xisoblashda odatda variatsion usullar ishlatiladi va bunda elektron sinov funksiyasi $\varphi(r)$ sifatida biror lokallashgan funksiya tanlanadi. Agar asosiy xolat energiyasini baxolashda sinov funksiyasi sifatida gauss funksiyasi $\varphi(r) \sim \exp(-\delta^2 r^2)$ tanlansa - u xolda (148) differensial tenglamani aniq echish mumkin.

Uygʻongan xolatlar uchun differensial tenglamani echish mushkul. Biroq, $F_q(r)$ funksiyani taqribiy echimini variatsion usulda qidirib koʻramiz. Buning uchun uning koʻrinishini quyidagicha tanlaylik

$$F_q(r) = g_q \exp(-i a_q \mathbf{qr}) \quad (149)$$

U xolda nomaʼlum a_q va g_q funksiyalarni (149) funksionalni minimum shartidan aniqlanadi. Umuman olganda, (149) approksimatsiyadan foydalangan xolda ixtiyoriy potensial maydonda xarakatlanuvchi elektronni asosiy va uygʻongan xolatlar energiyasini xisoblash mumkin.

(149)ifodani (148)funksionalga qoʻyib, g_q esa (148) ni minimum shartidan aniqlab quyidagini topamiz

$$J\{a_q, \varphi(r)\} = E_0 - \frac{4\pi\alpha \hbar \omega_0 l_0}{\Omega} \sum_q \frac{1}{q^2} \frac{|e_q|^2}{1 + a_q^2 l_0^2 q^2} \quad (148)$$

bu erda

$$e_q = \langle \varphi(r) | \exp[(1 - a_q)i\mathbf{qr}] | \varphi(r) \rangle. \quad (149)$$

Energetiya satxlarini xisoblash

Parabolik potensial maydonda xarakatlanuvchi elektronni $1s$ va $1p$ energiya xolatlari uchun normallashtirilgan sinov funksiyalarini quyidagicha yozib olamiz

$$\varphi_{1s}(r) = \frac{\delta^{3/2}}{\pi^{3/4}} \exp\left(-\frac{\delta^2 r^2}{2}\right) \quad (150)$$

$$\varphi_{1p}(r) = \frac{\sqrt{2}\delta^{5/2}}{\pi^{3/4}} z \exp\left(-\frac{\delta^2 r^2}{2}\right), \quad z = r \cos\theta \quad (151)$$

Bu erda δ - variatsion parametr bo'lib uni to'la energiyani minimum shartidan aniqlanadi. To'la energiya $1s$ va $1p$ energiya xolatlari uchun aloxida aniqlanadi, demak mos xolda δ - variatsion parametr xam turlicha δ_s va δ_p . Uyg'ongan $1p$ xolat to'liqin funksiyasi θ burchakka bog'liq bo'lgani sababli, noma'lum a_q funksiyani xisoblash qiyin masaladir. Xisoblarni soddalashtirish maqsadida taqriban uni burchakka bog'liq emas $a_q = a_q$ deb qidiramiz.

$$\varepsilon_{1s} = \frac{3\mu^2}{2} + \frac{3}{8\mu^2 R^4} - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{\exp[(1-a_x)^2 x^2 / (2\mu^2)]}{1+a_x^2 x^2} \quad (152)$$

$$\varepsilon_{1p} = \frac{5\mu^2}{2} + \frac{5}{8\mu^2 R^4} - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{\exp[(1-a_x)^2 x^2 / (2\mu^2)]}{1+a_x^2 x^2} \left[1 - \frac{(1-a_x)^2 x^2}{3\mu^2} + \frac{(1-a_x)^4 x^4}{20\mu^4} \right] \quad (153)$$

Bu erda δ o'rniga yangi o'lchamsiz variatsion parametr $\mu = \delta l_0$ kiritildi, shuningdek, $R = \sqrt{\hbar/2m\omega} / l_0$ belgilash – KN ni o'lchamsiz radiusi deb qarash mumkin.

Xususiyl xolda, agar $a_x = a$ deb olinsa, u xolda funksionallar LLPH natijalariga o'tadi. Funksional ma'nosiga ko'ra uyg'ongan $1p$ - xolatni to'la energiyasi bo'lib, unda polyarizatsiya potentsiallari xam $1p$ - xolat to'liqin funksiyasi orqali xisoblangan. Muxit polyarizatsiyasi elektron konfiguratsiyasiga mos kelgan bunday xolat – relaksatsiyalangan uyg'ongan xolat deb ataladi .

Xususan, agar $a_x = 0$ deb olinsa, u xolda (150) funksionallardan adiabatik kuchli bog'lanish natijalari kelib chiqadi.

Umumiy xolda, noma'lum a_x funksiyani $1s$ va $1p$ xolatlar uchun (150) i (151) funksionallarni minimum shartidan foydalanib topiladi. Natijada, a_x uchun $1s$ va $1p$ xolatlariga mos xolda 3- va 7- darajali algebraik tenglamalarni olish mumkin. Biroq, xisoblarni soddalashtirish maqsadida, a_x uchun soddaroq taqribiy funksiya tanlash maqsadga muvofiqdir. Buning uchun 3- darajali algebraik tenglamani iteratsion shakldagi echimidan foydalanamiz

$$a_x = \frac{1 + a_x^2 x^2}{1 + a_x^2 x^2 + 2\mu^2} \approx \frac{1 + \gamma x^2}{1 + \gamma x^2 + 2\mu^2} \quad (154)$$

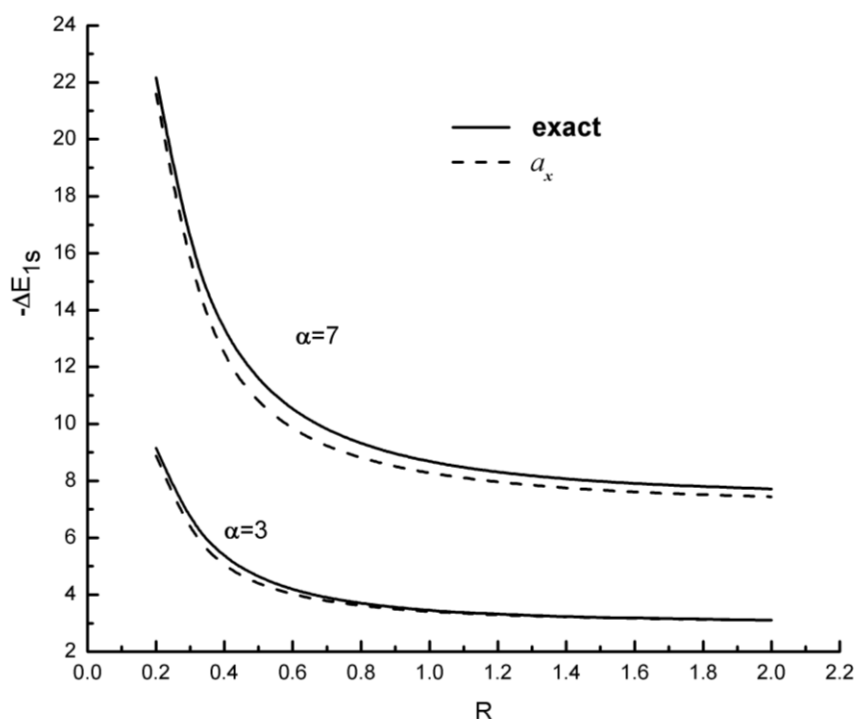
Bu erda, γ - yangi variatsion parametrlar bo'lib, $0 < \gamma < 1$. O'tkazilgan test xisoblashlarini ko'rsatishicha, taqribiy funksiya (154) differensial tenglamani aniq echimi juda yaqin natija berar ekan. Bundan tashqari, (154) taqribiy funksiya uyg'ongan xolat energiyasi uchun xam ancha aniq natija berar ekan, bu natijalar boshqa LLPH metodlarga nisbatan xam ancha aniqroq ekan.

Olingan natijalar muxokamasi

Muxit polarizatsiyasini xisobga olinmasa, qaralayotgan masala - sferik ossillyator masalasiga kelib, uning $1s$ va $1p$ xolat energiyalari $(3/2)\hbar\omega$ i $(5/2)\hbar\omega$ ga teng edi. Demak, polaron effektini ushbu satxlarga bergan tuzatmasi quyidagiga teng bo'lish kerak (energiyalar $\hbar\omega_0$ birligida yozilgan)

$$\Delta E_{1s} = \varepsilon_{1s} - \frac{3}{2R^2}, \quad \Delta E_{1p} = \varepsilon_{1p} - \frac{5}{2R^2} \quad (16)$$

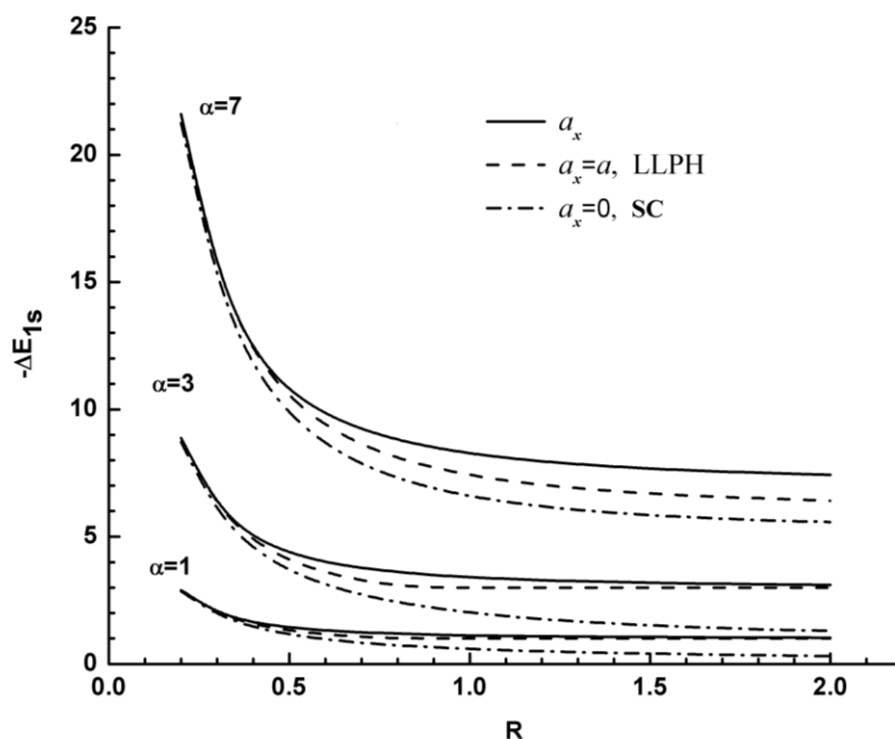
1-rasmda Fryolix doimiysini $\alpha = 3$ va $\alpha = 7$ qiymatlari uchun (154) dan foydalanib, $1s$ satxni polaronli siljishi ni KN radiusi R ga bog'lanishi tasvirlangan (shtrixli chiziq).



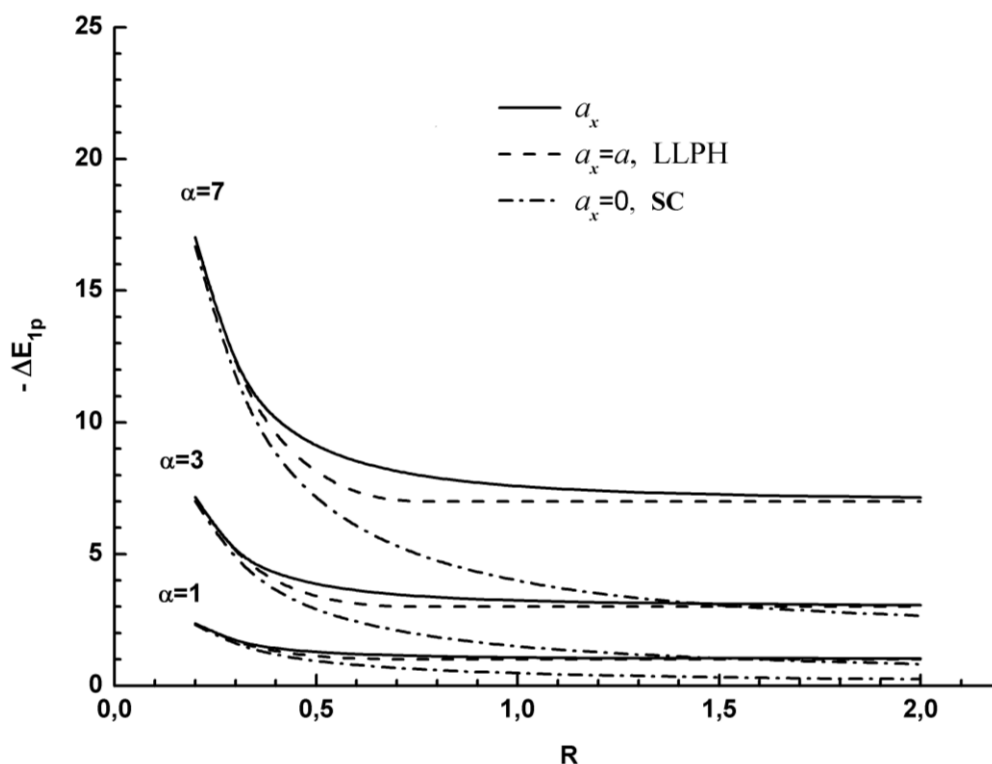
1-Rasm. Fryolix doimiysini $\alpha = 3$ i $\alpha = 7$ qiymatlarida, elektronni $1s$ satxini polyaronli siljishini KN ni o'lchamsiz radiusi R ga bog'lanishi grafigi: shtrixli chiziq – (15) funksiya asosida olingan, uzluksiz chiziq – aniq echim [15] asosida olingan.

SHu rasmda yana polyaronli siljishni tenglamani aniq echimga asoslangan natijalar xam keltirilgan (uzluksiz chiziq). Rasmdan ko'rinadiki, (approksimatsiyadan foydalanish barcha energiya satxlari uchun xam qoniqarli natija bera olar ekan.

2- va 3- Rasmlarda elektronni $1s$ va $1p$ energiya satxlarini polyaronli siljishini KN ning keltirilgan radiusi R ga bog'lanishi tasvirlangan: bunda approksimatsiya yordamida olingan bog'lanishi uzluksiz chiziqda, LLPH metodida olingan bog'lanishi shtrixli chiziqda, adiabatik kuchli bog'lanish metodida olingan bog'lanish esa shtrix-punktirli chiziqda keltirilgan.



2-Rasm. Fryolix doimiysini $\alpha = 1, 3, 7$ qiymatlarida, elektronni $1s$ satxini polyaronli siljishini KN ni o'lchamsiz radiusi R ga bog'lanishi grafigi: uzluksiz chiziq approksimatsiya yordamida olingan bog'lanish, LLPH metodida olingan bog'lanish shtrixli chiziq, adiabatik kuchli bog'lanish metodida olingan bog'lanish esa shtrix-punktirli chiziqda keltirilgan.



3-Rasm. Fryolix doimiysini $\alpha = 1, 3, 7$ qiymatlarida, elektronni $1p$ satxini polaronli siljishini KN ni o'lchamsiz radiusi R ga bog'lanishi grafigi: uzluksiz chiziq approksimatsiya yordamida olingan bog'lanish, LLPH metodida olingan bog'lanish shtrixli chiziq, adiabatik kuchli bog'lanish metodida olingan bog'lanish esa shtrix-punktirli chiziqda keltirilgan.

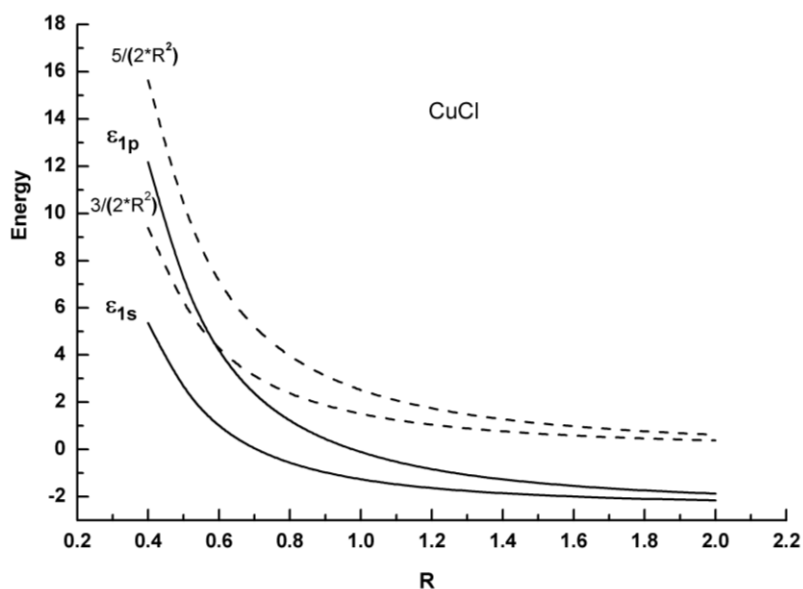
Ko'rinib turiptiki, polaron effektlarni energiya satxlariga beradigan tuzatmasi kuchli lokalizatsiya sharoitida $R/l_0 \ll 0.5$, ya'ni KN radiusi polaron radiusidan ancha kichik bo'lganda ortar ekan. Bu rejim adiabatik kuchli bog'lanishli polaron ga mos keladi: elektronni polyarizatsiya maydonidagi xarakat tezligi – ionlar xarakat tezligidan kattaroq va ionlar elektronga sinxron ergasha olmaydi.

$R/l_0 > 0.5$ bo'lgan xol oraliq bog'lanishli polaron rejimiga mos keladi: bunda energiya satxlarga qo'shimcha polaronli tuzatma - elektron-fonon korrelyasiyasi (ergashish) sababli paydo bo'ladi. Buymistrov-Pekar nazariyasida ushbu korrelyasiya fononlar to'lsin funksiyasi (3) ni elektronni koordinatasiga bog'lanishi orqali xisobga olingan.

2- va 3- rasmlardan ko‘rinishicha, (15) taqribiy funksiya energiya satxlarini polyaronli siljishini KN radiusiga bog‘lanishini boshqa taqribiy metodlarga nisbatan ancha aniq xisoblashga imkon berar ekan.

LLPH, ($a_x = a$) metodini taqribiyligi shundan ko‘rinadiki, KN radiusi qiymati $R/l_0 > 0.5$ bo‘lgandayoq satxlarni polyaronli siljishi Li-Lou-Payns nazariyasidagidek α tartibida doimiy qoladi – ya’ni KN radiusiga deyarli bog‘liq emas (3- rasmga qarang).

4-rasmda (15) approksimatsiya asosida xisoblangan elektronni $1s$ va $1p$ energiya satxlarini KN radiusi R ga bog‘lanishi keltirilgan. Fryolix doimiysi $\alpha = 2.45$ olingan, bu qiymat taxminan CuCl yarimo‘tkazgichiga mos keladi.



4-Rasm. CuCl ($\alpha = 2.45$) yarimo‘tkazgichdan tayyorlangan KN dagi elektronni $1s$ va $1p$ energiya satxlarini KN radiusi R ga bog‘lanishi: uzluksiz chiziq – polyaron effektlar xisobga olingan, shtrixli chiziq – polyaron effektlar xisobga olinmagan.

X U L O S A

O'tkazilgan tadqiqotlarga asoslanib xulosa qilish mumkinki, ushbu ishda kvant nuqtadagi elektronni energiya satxlarini aniqlash uchun polaron effektlarni xisobga olishda BP metodi qo'llanildi, kvant nuqtani siquvchi potentsiali ko'rinishini - parabolik deb olindi. differensial tenglamani echish qiyinligi sababli uni echimini ba'zan kuchli va kuchsiz o'zaro ta'sir rejimlarda olingan aniq echimlarni chiziqli kombinatsiyasidan foydalanishadi. Ushbu metodni xajmiy polyar yarimo'tkazgichlarda qo'llanilganda, polaronli xolat energiyasini interpolyasion baxolashga erishiladi. Bunda polaron effekti tufayli tuzatma - kuchli o'zaro ta'sir $\alpha > \alpha_c (\sim 6 \cdot 8)$ rejimida paydo bo'ladi, bu xolda elektron to'lqin funksiyasi polyarizatsiya maydonida *lokallashgan* bo'ladi. $\alpha < \alpha_c$ bo'lgan soxada elektron to'lqin funksiyasi yoyiq xolatda (delokalizatsiya) bo'lib, polaronli xolat energiyasi mos keladi, ya'ni α ga proporsionaldir.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Ўзбекистон Республикаси Президенти Ислом Каримовнинг мамлакатимизни 2015 йилда ижтимоий-иқтисодий ривожлантириш якунлари ва 2016 йилга мўлжалланган иқтисодий дастурнинг энг муҳим устувор йўналишларига бағишланган Вазирлар Маҳкамаси мажлисидаги маърузаси
2. .O'zbekiston Respublikasi Konsitutsiyasi. O'zbekiston 2012-35 b
3. .Каримов И.А. Ўзбекистон XXI аср бўсағасида: хавфсизликка таҳдид, барқарорлик шартлари ва тараққиёт кафолотлари. –Т.: Ўзбекистон, 1997. –112б. Ўзбекистон Республикасининг “Таълим тўғрисидаги” Қонуни // Баркамол авлод-Ўзбекистон тараққиётининг пойдевори.-Т.: Ўзбекистон, SHik A.YA., Bakueva L.G., Musixin S.F., Rykov S. A. Fizika nizkorazmernых sistem. - SPb.: Nauka, 2001. 160 s.
4. V.L. Bonch-Bruevich, I.P. Zvyagin, R. Kayper, G. Mironov, R. Enderlayn, B.Esser. Elektronnyaya teoriya neuporyadochennых poluprovodnikov (M., jNauka, 1981). 384 c.
5. G. Gulyamov, N.YU. SHaribaev. FTP, 45, 178 (2011).
6. G. Gulyamov, U.I. Erkaboev, N.YU. SHaribaev. FTP, 48, 1323 (2014).
7. B. Ridli. Kvantovыe protsessы v poluprovodnikax (M., Mir, 1986).
8. 304с. B.K.Ridley. Quantum processes in semiconductors. Clarendon Press. Oxford.1982.
9. G. Gulyamov, A.G. Gulyamov, G.N. Majidova. Tenzorezistivnyy effekt v sisteme potentsialных barerov v

poluprovodnikovыx plenkax // Nedorezov S.S. // FTT. 1970. T.12. № 8. S.2269-2276.

10. Matulis A., Piragas K. // FTP. 1975. T.9. № 1 S.2202-2204. Dyakonov M.I., Khaetskiy A.V. // JETP. 1982. T.82. № 5. S.1584-1590.

11. Merkulov I.A., Perel V.I., Portnoy M.E. // JETP. 199 T.99. № 4. S.1202-1214.

12. Bir G.L., Pikus G.E. Simmetriya i deformatsionnyye effekti v poluprovodnikax.M.: "Nauka", 1972. - 584s.

13. Bastard G. Wave mechanics applied to semiconductors heterostructures, Le Ullis Ed. De Phys., 1988, 360 p.

14. Pikus G., Ivchenko E. Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Fizicheskaya injeneriya poverxnosti, -2013.- T. 11, № 2, str. 243-245.

15. Ж.И.Алфёров. ФТП, 32 (1), 3 (1998).

A. Lorke, J.P. Kotthaus, K. Ploog, Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 2559.

16. L. Banyai, S. Koch. Semiconductor Quantum Dots (World Sc. Publ. Co.,

17. Singapore, 1993).

18. A.S. Alexandrov and J.T. Devreese, Advances in Polaron Physics, Springer

19. Series in Solid-State Sciences 159, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2010,

20. DOI: 0.1007/978-3-642-01896-1_6

21. R. R. Hudgins, P. Durourd, J. M. Tenenbaum, and M. F. Jarrold, Phys. Rev.

22. Lett. 78, 4213 (1997). E.P. Pokatilov, V.M. Fomin, J.T. Devreese, S.N. Balaban, S.N. Klimin,

23. Physica E4 (1999) 156.
24. С.И.Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов (М.-Л.,
25. Гостехиздат, 1951).
26. И.П. Ипатова, А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТТ, 37, 1819 (1995).
27. I.P. Ipatova, A.Yu. Maslov, O.V. Proshina. Phys. Low-Dim. Structur., № 4-5,
28. 1, (1996).
29. . S.Mukhopadhyay, A. Chatterjee, J. Phys.: Condens. Matter. 11 (1999) 2071.
30. В.М.Буймистров, С.И.Пекар. ЖЭТФ 32, 5, 1193 (1957).
31. E.P.Gross. Ann.Phys. (N.Y) 8, 78 (1959).
32. П.Ж. Байматов, Ш.Т. Иноятов. Укр.Физ.Журн. Т 60, № 3, 279 (2015).
33. А.С.Давыдов. Квантовая механика. Физматгиз, М. 748 с. (1963).]. Г. Гулямов, У.И. Эркабоев, Н.Ю. Шарипбаев. ФТП, 48, 1323 (2014).
34. Б. Ридли. Квантовые процессы в полупроводниках (М., Мир, 1986).
35. 304с. В.К.Ridley. Quantum processes in semiconductors. Clarendon Press. Oxford.1982
36. .www.kvantjournal.ru
37. www.mccme.ru