O’ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O’RTA MAXSUS TA’LIM VAZIRLIGI

FARG’ONA DAVLAT UNIVERSITETI

FIZIKA-MATEMATIKA FAKULTETI

5110200-Fizika va astronomiya o`qitish metodikasi yo‘nalishi 13.408 guruh bitiruvchisi **NAZIROV RAHMONALI**ning

Yarim o‘tkazgich va uning strukturalarida elektron energiya spektrini hisoblash mavzusidagi

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

Bitiruv malakaviy ish rahbari:

fiz.-mat.fanlari doktori, professor

______________ R.Ya.Rasulov

Farg’ona 2017

Bitiruv malakaviy ish kafedraning 2017 yil 5-iyundagi 9-tartib raqamli yig'ilishida muhokama qilingan va himoyaga tavsiya qilingan.

Kafedra mudiri _______________prof. K.E.Onarqulov

Taqrizchi:

1. Farg'ona politexnika institute professori, fizika-matematika fanlari doktori N.H.YULDASHEV

Mundarija

KIRISH

O‘zbekiston Respublikasining birinchi Prezidenti Islom Karimovning O‘zbekiston Respublikasi Mustaqilligining 18 yilligiga bag‘ishlangan tantanali marosimdagi tabrik so‘zida shunday dedilar: Hayotimizning ma’no-mazmuni, maqsadlari o‘zgarishi bilan xalqimizning, avvalo, yoshlarimizning ongu tafakkuri, dunyoqarashi, fikrlashi, siyosiy-huquqiy madaniyati va ijtimoiy faolligi yuksalib borayotganini va bunday ijobiy o‘zgarishlar bugungi va ertangi yutuqlarimizga mustahkam zamin tug‘dirayotganini katta mamnuniyat bilan ta’kidlaymiz.

O‘tgan davr mobaynida ko‘pni ko‘rgan, mehnatkash va bag‘rikeng xalqimiz haqiqiy mustaqillikka erishish, istiqlolimizni har qanday xuruj va g‘arazli, yovuz harakatlardan himoyalash yo‘lidagi mashaqqatli kurashlarda toblandi.

Yurtimizda hukm surayotgan tinch va osuda hayotning qadr-qimmatini, mintaqamizda millatlar va dinlararo totuvlikni asrash va mustahkamlash naqadar muhim ekanini chuqur anglab yetdi.

Gar shunday ekan Respublikamiz birinchi Prezidenti I.A. Karimov bugungi kun fizika yo’nalishi bakalavrlari oldiga keng qamrovli mutaxassis bo’lib yetishish vazifasini qo’ygan. Jumladan talabalar tomonidan tanlangan bitiruv malakaviy ish mavzusining aktual bo’lishini hamda bitiruv malakaviy ish egallagan sohasining imkon darajasida zamonaviy bo’lishini talab qilganligi sababli ushbu bitiruv malakaviy ishi yozildi.

Ushbu bitiruv malakaviy ishda yarim o‘tkazgichlar va ularning o‘lchamli kvantlashgan strukturalarida elektronlarning energetik spektri, energiyaning impulsga bog‘liqligini hisoblash usullariga bag‘ishlangan.

Mavzuning dolzarbligi. O‘lchamli kvantlashgan hodisaning batafsil o‘rganilishi 1966 yili (taxminan bir vaqtda) chop etilgan ikki guruh olimlarning ilmiy izlanishlari bilan boshlandi. Ayni paytda esa pasaytrilgan (bir yoki ikki) o‘lchamli kvantlashgan hodisalar juda keng ko‘lamda o‘rganilyapti. Bu izlanish ko‘lamining kengligi quyidagi sabablar bilan bog‘liq:

- mikroelektronika asboblarining asosiy ishchi tavsiflari sirtdagi va sirt oldi hodisalar bilan chambarchas bog‘langan.
- fundamental tabiatli hodisalar, masalan, mott o‘tishlarining, anderson lokalizatsiyasining o‘ziga xosligi, manfiy magnitoqarshilik, kvantlashgan xoll hodisasi (xoll o‘tkazuvchanligining kvantlashishi) kabi jarayonlar ikki o‘lchamli elektronli hodisalar bilan uzviy bog‘langan.
- o‘ta katta ta’sirli tranzistorlarining ikki o‘lchamli elektronli sistemalarda katta o‘tkazuvchanlikli kanallarning yuzaga kelishi bilan tushuntirilishi va katta hajmdagi informatsiyali (xotirali) sistemalarda geteroqatlamli tuzilmalarning ishlatilishi ko‘p sohada ikki o‘lchamli tizilmalar fizikasi bilan bog‘liq.
- lazerlar fizikasini geteroqatlamli tizilmalarsiz tasavvur etish qiyin. Ayni vaqtda qattiq jismlar fizikasi, ayniqsa yarim o‘tkazgichlar fizikasi sohasida olib borilayotgan izlanishlarning salmoqli ulushi ikki o‘lchamli tizimlar – geterotuzilmalarda kechadigan fizik jarayonlarni o‘rganish bilan chambarchas bog‘liqdir.

Xususan o‘lchamli kvantlarning har xil xususiyatlarini o‘rganishgagina bag‘ishlangan alohida xalqaro ilmiy anjumanlarning o‘tkazilishi bu fikrmizning dalili bo‘la oladi. Shu sababli bu sohadagi nazariy izlanishlar o‘z zamonaviyligi va dolzarbligini yo‘qotgani yo‘q, aksincha amaliy ahamiyati ortib bormoqda.

Yarim o‘tkazichlar fizikasining hozirgi zamon taraqqiyotidagi asosiy ilmiy izlanishlar murakkab ko‘p qatlamli geteroo‘tishlarga qaratilgan. Bu hol, tabiiyki, yarim o‘tkazichlarning texnologiyasi qay daraja bog‘liq bo‘lsa, fizikasiga ham shu darajada bog‘liqdir. Bunday geteroo‘tilishlarda kechadigan elektronli fizik jarayonlari o‘lchamli kvantlashgan o‘rachalar yoki o‘ta panjarali yarim o‘tkazichlar fizikasi yordamida tushuntirish mumkin.

O‘ta panjarali yarim o‘tkazichlar deyilganda o‘z kristall (davriy) potensialidan tashqari bir (yoki ikki, yoki uch) o‘lchamli, davri kristall panjarasidan sezilarli katta bo‘lgan, «begona» potensialli kristall tushuniladi. Birinchi bo‘lib bunday holni nazariy jihatdan L.V.Keldish (1962 y.) asoslab bergandi: tashqaridan kiritilgan «begona» potensialni kristallni davriy deformatsiyalovchi katta quvvatli, turg‘un ultratovush yordamida olish taklif etilgan.

A.A. Kastalskiy tomonidan turg‘un yorug‘lik to‘lqini yordamida ham «begona» potensial olish mumkinligi ko‘rsatib o‘tilgan edi.

Kristall strukturasida begona potensialni yana bir necha yo‘llar bilan hosil qilish mumkin:

a) agar bu potensial kimyoviy jihatdan ikki xil yarim o‘tkazichlarning davriy takrorlanib keluvchi yupqa qatlamlarni o‘stirish yo‘li bilan hosil qilingan panjarali yarim o‘tkazichlar (o‘ta panjarali yarim o‘tkazgich) kompozitsion o‘ta panjarali yarim o‘tkazgich (KO‘YAO‘) deb yuritiladi;

b) agar bu potensialni legirlanish turini davriy o‘zgartirish, masalan, ketma-ket davriy takrorlanuvchi n-va p-turli gomogenli hajmiy yarim o‘tkazgichlar hisobiga yuzaga kelsa, bunday o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarni legirlangan o‘ta panjarali yarim o‘tkazgich (LO‘PYaO‘) deb nomlanadi.

Shuni qayd etish ma’qulki, kompozitsion o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlardan qatlamlar kimyoviy tarkibining davriy o‘zgarishi bilan ta’qiqlangan zonalarining kengligi ham davriy o‘zgarib boradi. Shu hisobiga «begona», qo‘shimcha potensial hosil bo‘ladi.

Mexanika nuqtai nazaridan sistemani tekshirish uchun uning soni erkinlik darajasiga teng bo‘lgan tenglamalari tuziladi, so‘ngra, zarurat bo‘lganida, integrallanadi.

Bir qarashda sistemada zarralar soni juda ko‘p bo‘lganligi sababli, uni tekshirish o‘ta mushkul tuyuladi. Shu ma’noda ko‘p sonli zarrali sistemalarda yangi qonunlar yuzaga keladi va ular mexanika qonunlari yordamida emas, balki statistik usulda tekshiriladi. Shuningdek statistik mexanika yordamida holat tenglamalari yaratiladi, issiqlik sig‘imi hisoblanadi, ya’ni termodinamikada yechilmagan masalalar hal etiladi. Nihoyat statistik mexanika yordamida termodinamika qonunlarini qo‘llash va qo`llanish chegaralari, ularning buzilishlari (fluktuatsiyasi) va bu buzilishlarning masshtabi xususida masalalar hal qilinadi.

Statistik mexanikaning asosiy masalalarini matematik usulda hal qilish uchun fazaviy fazo tushunchasi kiritiladi. Aytaylik makroskopik mexanik sistema s erkinlik darajasili bo‘lsin, ya’ni uning fazodagi vaziyati S dona q_i koordinatalar bilan aniqlansin, bu yerda i 1dan sgacha qiymat qabul qiladi. U holda sistemaning har bir vaqt momentida s dona q_i koordinatalar va s dona p_i impulslar orqali aniqlanadi. Qaralayotgan sistemaning fazaviy fazosi 2s o‘lchamli bo‘lib, uning koordinata o‘qlariga q_i koordinatalar va p_i impulslarning qiymatlari qayd qilingan bo‘ladi. Bunda sistemaning har bir holatga fazaviy fazoda bitta nuqta mos keladi va bu nuqta sistemaning fazaviy nuqtasi deb yuritiladi; bunday nuqtalarni tutashtiruvchi chiziq fazaviy trayektoriya deyiladi.

Aytaylik sistema tashqi muhit bilan hech qanday ta’sirlashmasin, ya’ni u berk bo‘lsin. Unda juda kichik qismni-sistemachani ajratib olamiz. Bu sistemacha ham mexanik sistema, biroq berk sistema emas, ya’ni sistemani tashkil etuvchi qolgan sistemachalar bilan bog‘langandir. Qolgan sistemachalarning erkinlik darajasining katta miqdorliligidan ta’sirlashuv murakkab tabiatli bo‘ladi. Shu sababli qaralayotgan sistemachaning holati murakkab, ayrim hollarda chigallashib ketgan bo‘ladi. Yangi yaqinlashishning asosida qolgan sistemachalarning ta’siri murakkabligidan tekshirilayotgan sistemacha yetarli katta vaqt momentida barcha imkonli holatlar orqali o‘tadi degan mulohaza yotadi.

Legirlangan o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarda ta’qiqlangan energetik soha kengligi kristall bo‘ylab o‘zgarmas qolsada, ionlashgan aralashmalar yoyinki hajmiy (yuzaviy, chiziqli) davriy takrorlanuvchi zaryadlangan sohalardagi elektrostatik potensialning mavjudligi «begona», qo‘shimcha potensialning yuzaga kelishiga sabab bo‘ladi.

Texnologiya nuqtai nazaridan kompozitsion va legirlangan o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarni hosil qilish fikrini 1970 y. Yosaki va Su berishdi. Yosaki va Sular asosan kompozitsion o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarni qatlamlarini elektronning erkin yugurish yo‘lidan kichik qilib tayyorlashni va bunday hollarda, sun’iy hosil qilingan «begona» potensialning ta’sirida hajmiy kristallning tabiatiga mos kelmaydigan kinetik hodisalarning kechishini o‘qitilib o‘tdilar.

1971 yil yu.A. Romanov tomonidan legirlangan o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarning qator xususiyatlari batafsil o‘rganilgan. Xususan nii – davriy kristallarning o‘zlariga xos qator xususiyatlari birinchi bo‘lib nazariy tahlil etilgan. Ayni paytda atomar toza sirtli kristallarni olish texnologik jarayon o‘tkazish imkoni mavjud. Bu esa fizikaviy va kimyoviy tabiati oldindan kelishilgan o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlar olish imkoni beradi. Masalan molekulyar-nurli epitaksiya usuli yordamida GaAs-AlGaAs, InSb-GaSb tizimlarda o‘ta panjarali yarim o‘tkazgich o‘stirilgan.

Bu yerda shuni qayd qilmoq kerakki, odatda o‘stirilgan ko‘pgina kompozitsion o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarda qatlamlar qalinlgi (bir necha yuz angstrem) elektronlarning erkin yugurish masofasiga nisbatan kichik tanlanganligi sababidan, qatlam sirtiga tik yo‘nalishda o‘lchamli kvantlashgan hodisalar sodir bo‘ladi. Bu yo‘nalishga tik - qolgan ikki yo‘nalishda kristall o‘z xususiyatini saqlab qoladi.

Ayni vaqtda spinli o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlar – magnitli va magnitsiz aralashmali yarim o‘tkazgich qatlamlarning ketma-ket davriy joylashgan to‘plami ham, shuningdek qutblangan o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlar – yuqori kristall indekslarga ega bo‘lgan sirtlar ham o‘ta panjarali yarim o‘tkazgich tabiatli bo‘lishi mumkin.

CdTe – $Cd_{1-x}Mn_xTe$ asosida olingan ayrim, «begona» potensialni yuzaga keltirib o‘ta panjarali yarim o‘tkazgich olingan.

Al va Ga elementlarning valentligi va ionli radiuslari miqdoran bir-biriga juda yaqin. Shu sababdan GaAs kristalliga bermaydi. Eng asosiy Al miqdoriga qarab potensial to‘siq balandligini tanlash mumkin. Shuningdek GaAs birikmasining ko‘pgina texnologik jarayoni to‘la-to‘ks o‘rganilgan. Shu boisdan keyinchalik, asosan, bunday o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarga nisbatan tekshirish olib boramiz.

Umuman olganda, ikki o‘lchamli tizimlar xususida olib borilayotgan tekshirishlar aktual ekanligidan, bunday tizimlarning optik va fotoelektrik xususiyatlarini o‘rganish, ayniqsa, nazariy o‘rganish sohasi kam tekshirilgan sohalardandir.

Ilmiy izlanishlar sohasida hajmiy kristallardan ikki o‘lchamli kvantlashgan tizimlarga o‘tilishi yangi, keskin tabiatli hodisalarning ochilishiga sabab bo‘ldi. Bunday tabiatli hodisalar turkumiga past chastotali, energiyasi Brillyuen zonasining katta simmetriyali nuqtalaridagi energetik oraliklariga nisbatan juda kichik bo‘lgan yorug‘lik yutilishining va har xil tabiatli fototoklarning fotonlar qutblanish darajasiga va qaralayotgan namunaning kristallografik o‘qlari bilan yorug‘likning qutblanish tekisligi orasidagi burchakka bog‘liqligi kabi jarayonlar kiradi.

Bitiruv malakaviy ishda jamlangan miqdoriy hisoblashlar qaralayotgan hodisalar yoki ular mexanizmlarining sifatli yoki miqdoriy nazariyalarini qurish imkonini bergan. Masalan. elementar panjarasi kub simmetriyali bo‘lgan hajmiy yarim o‘tkazgichli kristallarning valent zonalari ikki tarmoq: og‘ir va yengil kavaklar tarmoqlaridan iborat bo‘lib, ular spin e’tiborga olinganda ikki karrali aynigan bo‘lib to‘lqin vektorining ixtiyoriy noldan farqli qiymatlar sohasida o‘zaro kesishishmaydi. Biroq bu tadbiq ikki o‘lchamli elektronli tizimlarda, masalan, geterotizilmalarda, og‘ir va yengil kavaklar tarmoqlari o‘lchamli kvantlashishish mumkin. Bunday hollarda og‘ir kavaklar zonachasining tarmog‘i bilan yengil kavaklar zonachasining tarmog‘i o‘lchamli kvantlashishi jarayonida biri ikkinchisini kesib o‘tishi mumkin. Bu esa kesishish nuqtalarida kavaklar «og‘ir» va «engil» kavaklar mazmunini yo‘qotadilar va tizilmalarning optik xususiyatlari mana bunday «maxsus» nuqtalarda keskin tabiatli bo‘lib qoladilar. Oxirgi keltirilgan hol yarim o‘tkazgichli tizimlarda keskin tabiatli optik va fotoelektrik hodisalarning namoyon bo‘lishiga sabab bo‘lib qoladilar.

Ushbu **bitiruv malakaviy ishning maqsadi** yarim o‘tkazgichdagi erkin tok tashuvchilar va kvantlashgan o‘rali hamda o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarning tizilmalarida tok tashuvchilar energetik spektrini va ularda fotonlar ishtirokida kechadigan jarayonlarni nazariy o‘rganish; olingan nazariy ilmiy natijalarning zamonaviy yarim o‘tkazgichli elektronikadagi o‘rnini tavsiflab berishdan iborat. Bunday tekshirishlarda, alohida qayd etilgan bo‘lmasa, yarim o‘tkazgichlarni murakkab valent zonali yarim o‘tkazgichlar sifatida, masalan, kavakli o‘tkazuvchanlikka ega bo‘lgan arsinedli galliy kabi, qaraladi.

Bitiruv malakaviy ishning **ilmiy yangiligi** yarim o‘tkazgichli tizilmalarda elektronli hodisalarni nazariy tahlil qilishda zarur bo‘lgan energetik spektrlar hisoblangan va ularni hisoblash usullariga yetarlicha sharhlar berilganligi bilan tavsiflanadi.

Bitiruv malakaviy ishning **ilmiy aspektdagi aktualligi** yarim o‘tkazgichlarning har xil tabiatli tizilmalarida, jumladan o‘lchamli kvantlashgan o‘rada yoki o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarda foton ishtirogida kechadigan jarayonlarning nazariy hisoblashlari va ularning tahlillari keltirilgan. Bu hol tizilma asosi – yarim o‘tkazgich kristalli panjarasining simmetriyasiga bog‘liq holda qaralgan fizikaviy kinetika fanining rivojlanishiga o‘z hissasini qo‘shadi. Bitiruv malakaviy ishda tanlangan fotonli hodisalarning nazariyasi, o‘z navbatida, optik va fotoelektrik hodisalarning ham nazariy, ham eksperimental o‘rganilishida ham katta ahamiyat kasb etadi. SHuningdek fotonli hodisalar bo‘yicha olib borilgan yoki olib borilishi rejalashtirilgan eksperimental ilmiy izlanishlarning asosi bo‘la oladi.

Bitiruv malakaviy ishning **amaliy ahamiyati** olingan natijalarining lazerli nurlanishlarni registratsiya qilish sohalarida qo‘lanilishi, shuningdek yorug‘likning qutblanishini his qiluvchi fotoqabul qilgichlar sifatida ishlatilishi bilan tavsiflanadi. Elektr signallarning yarim o‘tkazgich va uning har xil tabiatli tizilmalarida hajmiy ko‘rinishda yozilishi, fotorefraksiya hodisasiga asoslangan. Biroq bunday yozilmalarni nafaqat hajmiy, balki sirtiy, shuningdek nafaqat yorug‘likning intensivligiga nisbatan, balki fotonlarning qutblanishi darajasiga nisbatan ham olib borilishi mumkin. Fotonli jarayonlarni tavsiflovchi kattaliklarning, masalan, yutilish koeffitsiyenti, yoki fototok kabi kattaliklarning spektral yoki haroratiy tahlili yordamida tizilmaning noma’lum kattaliklarini, masalan, elektron-foton yoki elektron- fonon o‘zaro ta’sir doimiyliklarning miqdoran aniqlanishi mumkinligi bitiruv malakaviy ishda qaralayotgan samaralarning amaliy ahamiyatini yorita oladi.

Bitiruv malakaviy ishning strukturasi. Bitiruv malakaviy ishning Kirish qismida mavzuning aktualligi, dolzarbligi, ilmiy yangiligi, amaliy ahamiyati, asosiy xulosalar va bitiruv malakaviy ishni yozishda ijodiy foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati keltirilgan.

Birinchi bobda hajmiy yarim o‘tkazgichlardagi erkin tok tashuvchilarning energetik spektrini hisoblash usullaridan kp-metod va invariantlar usuliga to‘xtab o‘tilgan, ularning hisoblash usullari yoritilgan, olingan natijalar tayon etilgan.

Ikkinchi bobda o‘lchamli kvantlashish yarim o‘tkazgichlardagi tok tashuvchilarning energetik spektri hisoblangan. Natijada energetik spektrning diskret qiymatlar qabul qilishi, ya’ni namuna o‘lchamiga bog‘liq kvantlashishi kvant mexanikaviy yo‘l bilan hisoblangan. Bunda nanoo‘ra, nanoip va nanonuqtalardagi tok tashuvchilar energetik spektri hisoblangan, tahlillari bajarilgan. Tabiiyki, tok tashuvchilar energetik spektrining kvantlanishi, shuningdek Blox elektronlarining uch o‘lchamli fazodagi bir o‘lchamli kvantalashganligi bois, to‘lqin vektorining ikki tashkil etuvchisi yaxshi kvant soni mazmunini yo‘qotmagan bo‘lsada, uchinchi tashkil etuvchisi elektronning yaxshi kvant soni bo‘la olmaydi. Bunday paytlarda elektronli optik o‘tishlar, hajmiy kristallardan farqli o‘laroq, ikki kaskadli kechadi: birinchisi hajmiy kristallardagi kabi zonala yoki zonalarning tarmog‘lari, masalan, og‘ir va yengil kavaklar tarmoqlari, o‘rtasida kechsa, ikkinchisi o‘lchamli kvantlashgan sathlararo boradi. Qayd etilgan ikkinchi optik kaskad – yo‘lning «ruxsat etilganligi» yutilishlarda keskin tabiatli hollarni yuzaga keltirishi mumkin.

Bitiruv malakaviy ishda keltirilgan vektor kattaliklar ustiga chizilgan yo‘nalishli chiziqli harflar: $\vec{a}$, vektorlarning skalyar va vektorial ko‘paytmalari mos holda: $\vec{a}\cdot\vec{b}$ va $[\vec{a}\times\vec{b}]$, uch karrali integrallar: $\int d\vec{k} = \int dk_x \int dk_y \int dk_z$ ko‘rinishda qayd etilgan. $\delta(x)$, $\theta(x)$ - mos holda Dirakning δ va θ - pog‘onali teta funksiyalardir. Xususan: $\delta(\vec{k}) = \delta(k_x)\delta(k_y)\delta(k_z)$ - uch o‘lchamli, $\delta(k_\perp)$ -ikki o‘lchamli δ-

funksiyalardir; δ_{ij} - Kronekker simvolidir; $i \neq j$ hol uchun $\delta_{ij} = 0$ va $i = j$ hol uchun $\delta_{ij} = 1$. ε_{ijl} - birlik uch o‘lchamli antisimmetriyaviy tenzor. Takrorlanuvchi indekslar: i,j,l,n,m,α, β, γ ,=x,y,zlar bo‘yicha summasi olinadi deb tasavvur etish kerak.

1-bob. TOK TASHUVCHILAR ENEGETIK SPEKTRLARINI HISOBLASH

Bu bobda hajmiy kristallarning, (asosan yarim o‘tkazgichli) zonaviy tuzilishlarini hisoblashlarda ishlatiladigan hisoblash usullari keltirilgan.

Erkin elektronlar energetik spektrini hisoblashda aniqlik darajasi yuqori bo‘lgan uch usul: $\vec{k}\vec{p}$-usuli, samaraviy massa usuli va invariantlar usuli tanlanib, ular hisobiga olingan natijalarning tahlillari bajarilgan.

1.1. $\vec{k}\vec{p}$ - hisoblash usuli

Ma’lumki, yarim o‘tkazgichlarda tok tashuvchilar-o‘tkazuvchanlik zonasida elektronlar, yoyinki valent zonasida kavaklarning[1)] konsentratsiyasi (hajmi birligidagi soni) metalldagi elektronlar konsentratsiyasiga nisbatan anchayin kichik va ular o‘z zonalarida kichik energiyali holatlarni egalagan bo‘ladi. Shu sababli kristalli yarim o‘tkazgichlardagi tok tashuvchilarning energetik spektrini hisoblashlarda qaralayotgan zonaning ekstremumi – yuqori simmetriyali nuqtalariga nisbatan kichik energetik oraliklari bilan chegaralanish kifoya. Tok tashuvchilarning ekstremum nuqtalari yaqin sohalardagi energetik spektrini hisoblash uchun, asosan, ikki usul: $\vec{k}\vec{p}$ - usul va invariantlar usuli qo‘llaniladi. Amalda ushbu ikki usul ham simmetriya tasavvurlariga asoslangan, chunki energetik spektrning umumiy ko‘rinishigina ahamiyatlidir. Energetik spektrning ifodasidagi doimiyliklar, masalan, samaraviy massa yoki g – faktor, odatda, tajriba natijalar yordamida aniqlanadi. Kelgusida $\vec{k}\vec{p}$-hisoblash haqida fikr yuritamiz.

$\vec{k}\vec{p}$-usulda kristalldagi elektron uchun yozilgan

$$(H_0 - E)\psi = 0 \tag{1.1}$$

Shredinger tenglamasining yechimi bo‘lib hisoblangan ψ to‘lqin funksiyasi $\vec{k}_0$ (impulslar fazosidagi) ekstremumi yaqinida

$$\varphi_{n\vec{k}} = \psi_{n\vec{k}_0} e^{i\vec{k}\vec{r}} \tag{1.2}$$

to‘lqin funksiyalar bo‘yicha qatorga yoyiladi; bu turda

$$H_0 = \vec{P}^2(2m)^{-1} + V_0(\vec{r}), \tag{1.1a}$$

$\vec{P} = i\hbar\vec{\nabla}$-impuls operatori, m – erkin elektronning massasi, $V_0(\vec{r})$ - kristallning davriy potensiali.

Psevdoblox funksiyalari deb nomlanuvchi $\varphi_{n\vec{k}}$ funksiyalar, $\varphi_{n\vec{k}}$ blox funksiyalardan farqli o‘laroq, $\vec{K} = \vec{k} + \vec{k}_0$ nuqtada (1.1) tenglamani yechimi bo‘lib hisoblanmaydi; biroq u funksiyalarni $\vec{K}$ ga ham mos keladi va shu sababli $\varphi_{n\vec{k}}$ funksiyalarni $\varphi_{n\vec{k}}$ lar bo‘yicha qatorga yoyish mumkin:

$$\psi_{n\vec{k}} = \sum_{n`} C_{n`} \varphi_{n\vec{k}} \quad . \tag{1.3}$$

Agar (1.3) ni (1.1) ga quyib chap tomonidan $\varphi_{n\vec{k}}$ ga ko‘paytirib $\vec{r}$ bo‘yicha integrallasak noma’lum C_m koeffitsiyentlari aniqlash imkoni beruvchi tenglamalar tizimiga ega bo‘lamiz:

$$\sum_{n`} \left\{ \left[ E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right] \delta_{nn`} + \frac{\hbar}{m} \vec{k}\vec{p}_{nn`} \right\} C_{n`} = 0 \tag{1.4}$$

Bu yerda $\vec{p}_{nn`}$ impuls operatorinng matritsa elementlari:

$$\vec{p}_{nn`} = \int \psi^*_{n\vec{k}_0} \vec{p} \psi_{n`\vec{k}_0} d\vec{r} \tag{1.5}$$

(1.4) dagi $\dfrac{\hbar}{m}\vec{k}\vec{p}_{nn`}$ hadni g‘alayon (qo‘zgatuvchi) operatori sifatida qarash mumkin.

(1.4) tenglamani g‘alayonlar (qo‘zgalishlar) nazariyasi yordamida yechib energetik spektr va to‘lqin funksiyalarni, ya’ni ekstremum $E_n(\vec{k}_0)$ yaqinida $C_{n'}$ koeffitsiyentlarni topish mumkin. Masalan g‘alayonlar nazariyasining ikkinchi tartibli yaqinlashishida

$$\sum_n (H_{nn'} - E\delta_{nn'}) C_{n'} = 0 \tag{1.6}$$

tenglamalar tizimini xosil qilamiz: bunda

$$H_{nn'} = \left[E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m}\vec{k}\vec{p}_{nn'} + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \sum_{\substack{n', n \neq n'' \\ \propto, \beta}} k_\propto k_\beta (P^\propto_{nn''} P^\beta_{n''n'} + P^\beta_{nn''} P^\propto_{n''n'}) x \tag{1.7}$$

$$x\left(E_n(\vec{k}_0)-E_{n''}(\vec{k}_0)\right)^{-1}+(E_{n'}(\vec{k}_0)-E_{n''}(\vec{k}_0))^{-1}$$

Agar bir zonali yaqinlashish bilangina chegaralansak o‘zaro bog‘liq bo‘lmagan C_n koeffitsiyentlarning soni zonaning $\vec{k}_0$ nuqtadagi ayniganlik darajasi (karrasi) bilan aniqlanadi. Aynimagan zonalar uchun birdan bir koeffitsiyent $C_n=1$ va $\vec{k}$ ga nisbatan kvadratik yaqinlashishda energetik spektr quyidagi ifoda bilan topiladi

$$E_n(\vec{k})=E_n(\vec{k}_0)+\frac{\hbar}{m}\sum_{\propto}k_{\propto}P_{nn}^{\propto}+\sum_{\propto,\beta}\frac{\hbar}{2m_{\propto\beta}}k_{\propto}k_{\beta,} \tag{1.8}$$

bunda $\frac{1}{m_{\propto\beta}}=\frac{1}{m}+\frac{1}{m^2}\sum_{n,n''}\frac{P_{nn''}^{\propto}P_{n''n'}^{\beta}+P_{nn''}^{\beta}P_{n''n'}^{\propto}}{E_n(\vec{k}_0)-E_{n''}(\vec{k}_0)}$. Masalan, asosiy o‘qlar tizimiga nisbatan $m_{\propto\beta}^{-1}$ tenzor, umuman olganda, uchta chiziqli bog‘lanmagan m_{xx}^{-1},m_{yy}^{-1} va m_{zz}^{-1} tashkil etuvchilardan iborat. Asosiy o‘qlarning holatlari $\vec{k}_0$ to‘lqin vektorining simmetriya guruhlari bilan aniqlanadi.

Aynigan zonalar uchun energiya

$$\det\left\|H-E\cdot 1\right\|=0 \tag{1.9}$$

sekulyar (asriy) tenglamaning yechimlaridan topiladi.

O‘zaro yaqin joylashgan bir necha zonali yarim o‘tkazgichlarda yechimni, ko‘pincha, $\vec{k}$ ning darajasiga nisbatan yoyilgan qator sifatida izlash yetarli emas. Bunday hollarda (1.4) ifodada bir vaqtning o‘zida o‘zaro yaqin joylashgan $E_1(\vec{k}_0),E_2(\vec{k}_0),\ldots$ ga teng bo‘lgan $E_n(\vec{k}_0)$ energiyali zonalarni e’tiborga olish mumkin. Bu holga mos keluvchi (1.9) aniqlovchi (det)- determinant ham E_n qiymatli ($\vec{k}_0$ nuqtada spektrning qaralayotgan tarmog‘igagina qarashli bo‘lgan) bir zonali «diagonal» H_{nn} hadlarni, ham har xil tarmoqlar orasidagi- «nodiagonal hadlarni o‘z ichida oladi. Bunda diagonal va nodiagonal elementlardagi n'' bo‘yicha yig‘indi boshqa zonadagi, ya’ni $n''=n_1,n_2,...$, holatlar bo‘yicha olib boriladi, $H_{nn''}$ dagi $\vec{k}$ ga nisbatan chiziqli zonalararo kodlarda esa aniq (aynan) olinadi.

Yarim o‘tkazgichlardagi tok tashuvchilarning spektrning tabiatiga spin-orbital o‘zaro ta’sir:

$$H_{so}=\frac{\hbar}{4m^2c^2}\left(\left[\vec{\nabla}V_0\vec{P}\right]\vec{\sigma}\right) \qquad (1.9)$$

yetarlicha ta’sir ko‘rsatadi, bunda $\vec{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ Pauli matritsalari [6]. Xususan spin-orbital o‘zaro ta’sir $\vec{k}_0$ ekstremum nuqtada zonaning aynish darajasini kamaytirishi mumkin va mos termlarni o‘zaro ajralib tizginlashishiga olib kelishi mumkin. Simmetriya markazisiz kristallarida $\vec{k}_0$ yuqori simmetriyali nuqtalaridan uzoqlashgan sari spin-orbital o‘zaro ta’sir natijasida ayniganlik to‘lasicha yo‘qolishi mumkin; bu hol $H(\vec{k}_0)$ gamiltonianda spinga bog‘liq bo‘lgan to‘lqin vektorga nisbatan chiziqli va kub (uchinchi daraja)li hadlarning yuzaga kelishi bilan bog‘liq.

$\vec{k}\vec{p}$- usul chegarasida spin-orbital o‘zaro ta’sirni hisobga olish ikki xil usulda olib borilishi mumkin. Agar spit-orbital energetik ajralish boshqa zonalargacha bo‘lgan energetik masofaga nisbatan kichik bo‘lsa, u holda H_{so} xadni g‘alayon sifatida qarash mumkin, bazis (asosiy) funksiyalari sifatida koordinatali $\psi_{n\vec{k}}$ funksiyaga $\pm 1/2$ spinga mos keluvchi $\alpha=|\uparrow\rangle$ va $\beta=|\downarrow\rangle$ spinorlarga ko‘paytirib olingan funksiya tanlanadi. Bunda (1.7) munosabatda H_{so} operatorning zonada spin-orbital ajralishishni aniqlovchi bitta zonaga qarashli (matritsa) o‘zaro kesishuvchi

$$\frac{\hbar}{4m}\sum_{\substack{n',n\neq n''\\ m}} k_\alpha \left[P^{\alpha}_{nn''}(H_{so})_{n''n'}+(H_{so})_{nn''}P^{\alpha}_{n''n'}\right]\left[\frac{1}{E_n(\vec{k})-E_{n''}(\vec{k})}+\frac{1}{E_n(\vec{k})-E_{n''}(\vec{k})}\right]$$ hadlarni

ham e’tiborga olish kerak. Bundan tashqari, aslida, energetik maxrajlarda spin-orbital ajrashishni ham hisobga olish kerak. H operatorda H_{so}ni hisobga olinishi $\hat{p}$ impuls operatorini

$$\vec{\Pi}=\vec{P}+\frac{\hbar}{4mc^2}\left[\vec{\sigma}\vec{\nabla}V_0\right] \qquad (1.12)$$

bilan almashtirish bilan ekvivalentdir. $\vec{\nabla}V_0=\vec{\nabla}H_0=\frac{i}{\hbar}(pH_0-H_0p)$ bo‘lganligi uchun

$\Pi_{nn'} = P_{nn'} - i\dfrac{\hbar}{4mc^2}\left(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}\right)\left[\sigma\vec{p}\right]_{nn'} \left(E_{n\vec{k}} \equiv E_n(\vec{k})\right).$ Oxirgi had(yig‘indi)dan ko‘rinayaptiki, u bitta zonaga qarashli matritsa elementlarga o‘z ulushini qo‘sha olmaydi, shu sababli u to‘lqin vektoriga nisbatan chiziqli hadning sodir bo‘lishiga sababchi bo‘la olmaydi. Ko‘rilayotgan hisoblash usuli chegarasida bunday hadlar (1.1) ifodada kerakli hadlar e’tiborga olinganda yuzaga keladi, $\vec{k}$ ga nisbatan kub (uchinchi daraja)li hadlar esa energetik maxrajlarda spin-orbital ajrashishlar e’tiborga olingan holda g‘alayonlar nazariyasining $\vec{k}$ ga nisbatan uchinchi tartibli yaqinlashishida va to‘rtinchi tartibli: $\vec{k}$ ga nisbatan uchinchi tartibli H_{so} ga nisbatan birinchi tartibli yaqinlashishlarda sodir bo‘lishi mumkin. Odatda birinchi ulush ikkinchisiga nisbatan kattadir.

Spin-orbital o‘zaro ta’sirni hisobga olishning ikkinchi usulida $\psi_{n\vec{k}_0}$ bazis funksiyalari sifatida bir yo‘la mos spinorli tasavvur yordamida shakl almashinuvchi, ya’ni H_{so} e’tiborga olingan $H(\vec{k})$ ni diagonallashiruvchi, funksiyalar tanlanadi. Biroq bu holda $H(\vec{k})$ gamiltoniandagi qaysi bir hadning relyativistik kichik qiymatli ekanini topa olmaymiz; bu hol nolinchi burilish nuqtasi, ya’ni $\partial E / \partial k_i = 0$ shartni qanoatlantiruvchi nuqtalarni aniqlashda zaruriydir.

Simmetriya talablariga ko‘ra $\partial E / \partial k_i = 0$ xosila nol bo‘lgan nuqtalarni aniqlash $\vec{k}\vec{p}$ - hisoblash usulining asosiy masalalaridan biridir. $\vec{k}$ bo‘yicha chiziqli re-lyativistik hadlarga e’tibor nolinchi burilish nuqtalarini sezilarsiz siljishga olib keladi xolos, shu boisdan bu hadlarning ulushlariga e’tibor bermasa ham bo‘ladi. Brilluen zonasidagi markazidagi yoki sirtidagi maxsus nuqtalari bo‘lib $P^i_{nn`}(i = x, y, z)$ matritsa elementining uchchala tashkil etuvchilari ham simmetriya talablariga ko‘ra nolga teng bo‘luvchi nuqtalar hisoblanadi. Simmetriya o‘qlarida esa hech bo‘lmasa ikkita tashkil etuvchisining aylanishi yetarlidir.

Agar $\psi_{n\vec{k}_0}$ bazis funksiyalari $D^{\vec{k}_0}_{v}$ tasavvur bo‘yicha shakl almashtrilsa, u holda $P^i_{nn`}$ matritsa elementlari $D = D_1^- \mid D^{\vec{k}_0}_{v} \mid^2$ tasavvur bo‘yicha shakl almashadi.

Vaqtning inversiyasi shartida asosan qo'yiladigan talablarni hisobga olib noldan farqli chiziqli bog'lanmagan tashkil etuvchilarning sonini topishni o'quvchining o'ziga havola qilamiz; aynimagan zona uchun

$$N_0 = \hbar^{-1} \sum_{g \in G\bar{k}} \chi_1^{-}(g) \tag{1.13}$$

va $D_v^{\vec{k}_0}$ tasavvurga bog'liq emas, $\chi_1^{-}(g)$ – qaralayotgan tasavvurning xarakteri, $G\vec{k} - \vec{k}$ - to'lqin vektorining guruhi [2,5].

(1.7) va (1.8) ifodalardagi $\vec{k}$ ga nisbatan kvadratik chiziqli bog'liq bo'lmagan koeffitsiyentlarning sonini aniqlashda $\sum_{nn`} P_{nn``}^{\alpha} P_{n``n`}^{\beta}$ summani e'tiborga olish kerak, bu yerda yig'indi $E_{nn`}$ energiyali holatlar bo'yicha olib boriladi.

Yuqorida qayd etilgan barcha ifodalar elektronlar uchun o'rinlidir. Agar $\vec{k}_0$ ekstremum nuqtasida energiya maksimumga ega bo'lsa, u holda kavaklarning ekstremum yaqinidagi energetik oraliqda spektr (1.6)-(1.9) va (1.11) ifodalardan H ni –Hga, $\vec{k}$ ni - $\vec{k}$ ga almashtirish yo'li bilan topiladi. Bunda kavaklarning to'lqin funksiyalari bularga mos keluvchi elektron to'lqin funksiyalaridan $\psi_{hn} = K\psi_n$ munosabat yordamida topiladi; bu yerda K - vaqt inversiyasi operatoridir.

Mumtoz fizikada vaqtning inversiyasi, ya'ni t ni –t ga almashtirishda, koordinata o'z ishorasini o'zgartirmaydi, tezlik, impuls va harakat miqdori momenti o'z ishorasini o'zgartiradi. Kvant mexaniqasida bunday almashtirish K operatori bilan belgilanadi. Nol spinli zarrachalar uchun bu operator kompleks qo'shma-lashtiruvchi operatoridir; ½ (yoki unga karrali) spinli zarracha (yoki toq sonli zarrachalar) uchun bu operator koordinataga bog'lik to'lqin funksiyasining kompleks qo'shmasiga aylantiradi, spinli qisimning iδ_y matritsaga ko'paytirilishiga olib keladi).

1.2. Samaraviy massa usuli

Tashqi elektr va magnit maydonlaridagi tok tashuvchilarning energiyasi va to'lqin funksiyasini hisoblash uchun kristalldagi elektron uchun

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}[\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t)]^2 + V_0(\vec{r}) + e\varphi(\vec{r},t) + \frac{1}{2}g_0\mu_0(\hat{\vec{\vartheta}}\vec{B}) + H_{s0} \tag{1.14}$$

gamiltonianli Shredinger tenglamasini yechish talab etiladi. Bu yerda tashqi maydon $\varphi(\vec{r},t)$ skalyar va $\vec{A}(\vec{r},t)$ vektor potensiallar orqali ifodalangan $V_0(\vec{r})$ kristallning davriy maydoni g_0 – erkin elektronning g-faktori, μ_0 - bor magnetoni.

Agar tashqi maydon yetarlicha ravon bo‘lsa, ya’ni φ va $\vec{A}$ potensiallar panjara doimiyligi tartibidagi masofa zaif o‘zgarsa, ularning vaqtga nisbatan o‘zgarish chastotasi $\Delta E/\hbar$ ga nisbatan kichik bo‘lsa, u holda yuqorida qayd etilgan masalani faqat ravon tashqi maydondagi elektronning qayd etilgan masala kabi yechish mumkin, bunda ΔE $\vec{k}_0$ ekstremum nuqtasida boshqa zonachalarga bo‘lgan energetik masofa. Buning uchun (1.14) gamiltonianli Shredinger tenglamasining yechimini $F_n(\vec{r},t)$ ravon o‘zgaruvchi funksiyasini ekstremum nuqtasidagi blox funksiyasiga ko‘paytmasi ko‘rinishida ifodalanadi:

$$\psi = \sum_n F_n(\vec{r},t)\psi_{n\vec{k}_0} \quad . \tag{1.15}$$

G‘alayonlar nazariyasini qo‘llab $F_n(\vec{r},t)$ funksiyalar uchun tenglamalar tizimining ko‘rinishi

$$\sum_{n`}\left[H_{nn`} + (i)\hbar\delta_{nn`}\frac{\partial}{\partial t}\right]F_n(\vec{r},t) = 0 \tag{1.16}$$

kabi bo‘ladi $H_{nn`}$ gamiltonian g‘alanayonlar nazariyasining ixtiyoriy tartibi aniqligida hisoblash mumkin va (1.7) ifoda bilan aniqlantiruvchi $H_{nn`}$ operatoridan quydagi xususiyatlari bilan farq qiladi:

1. $H_{nn`}$ $e\varphi(\vec{r},t)\delta_{nn`}$ potensial energiyani o‘z ichiga oladi

2. $\vec{k}$ to‘lqin vektori

$$\vec{K} = \vec{k} + \frac{e}{\hbar c}\vec{A} \tag{1.17}$$

operatori bilan almashtiriladi, $k_i = -i\partial/\partial x_i$. Elektr maydon kuchlanganligi $\vec{\xi}$ va magnit maydon induksiya vektori $\vec{B}$

φ va $\vec{A}$ kattaliklar orqali

$$\vec{\xi} = -\nabla\varphi + \frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}, \vec{B} = rot\vec{A} \tag{1.18}$$

ifodalar yordamida ifodalangan.

3. Magnit maydonida $\vec{K} = \vec{k} + \frac{e}{\hbar c}\vec{A}$ operatorlari bir biri bilan kommutatsiyalashmaganligi uchun (1.16) gamiltonian simmetriyalangan $\{P_{\alpha,}P_{\beta}\}_{симм} = (P_n^{\alpha}P_{n`}^{\beta} + P_n^{\beta}P_{n`}^{\alpha})$ $\{K_{\alpha}, K_{\beta}\}_{симм} = (K_{\alpha}K_{\beta} + K_{\beta}K_{\alpha})/2$ ko‘paytma bilan birgalikda antisimmetriyalangan $\{P_{\alpha,}P_{\beta}\}_{ac} = (P_n^{\alpha}P_{n`}^{\beta} - P_n^{\beta}P_{n`}^{\alpha})$va $\{K_{\alpha}, K_{\beta}\}_{ac} = (K_{\alpha}K_{\beta} - K_{\beta}K_{\alpha})/2$ hadlarga ham ega. (1.17) ifodaga mos holda $\{K_{\propto}, K_{\beta}\}_{ac} = -ieB_{\gamma}\delta_{\propto\beta\gamma}/\hbar c$, bu yerda $\delta_{\propto\beta\gamma}$- Livi-Chivit (antisimmetrik birlik) tenzoridir: agar uchchala indekslari har xil bo‘lib to‘g‘ri tartibda kelsa, masalan *xyz,yzx,zxy* $\delta_{\propto\beta\gamma}$ =1; agar aksincha tartibda (masalan, *yxz,zyx*) kelsa $\delta_{\propto\beta\gamma}$ =-1; agar uchchala indekslarning ixtiyoriy bir juft indeksi bir xil bo‘lib qolsa $\delta_{\propto\beta\gamma}$ =0. Natija (1.16) ifodadagi $H_{nn'}$ gamiltonianing $\vec{k}$ ga nisbatan kvadratik yaqinlashishdagi ko‘rinishi

$$H_{nn'} = (E_n + e\varphi)\delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m}KP_{nn'} + \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\propto,\beta}\{K_{\propto}K_{\beta}\}_{симм} \times$$
$$\times\left\{\delta_{\propto\beta}\delta_{nn'} + \frac{1}{2m}\sum_{n''}(P_{nn''}^{\propto}P_{n''n'}^{\beta} + P_{nn''}^{\propto}P_{n''n'}^{\beta})((E_n - E_{n''})^{-1}\right.$$
$$(E_{n'} - E_{n''})^{-1})\} + \frac{1}{2}\mu_0\sum_{\propto}B_{\propto}\{q_0\sigma_{nn'}^{\gamma} - \frac{i}{m}\sum_{\propto,\beta,n'}\delta_{\propto,\beta,\gamma}P_{nn''}^{\propto}xP_{n''n'}^{\beta}[(E_n - E_{n''})^{-1} + (E_{n'} - E_{n''})^{-1}]\}.$$

Bu yerda $\psi_{n\vec{k}_0}$ xususiy funksiyalar H_{so} operatorni diagonallashtiruvchi funksiyalar sifatida qaralib, shuningdek spin orbital ajratish E_n ifodasida e’tiborga olingan deb hisoblaymiz. Bu funksiyalarni koordinatali φ_n va spinli $\chi_k(\hat{\alpha}$ *ёки* $\hat{\beta})$ funksiyalarning ko‘paytmasi ko‘rinishida yoki bunday funksiyalarning superpozitsiyasi shaklida ifodalash mumkin

$$\psi_n = \sum_{mk}C_{mk}^n\varphi_m\chi_k \tag{1.20}$$

(1.19) ga mos holda

$$\sigma^{\gamma}_{nn`} = \sum_{mkk`} C^{n*}_{mk} C^{n`}_{mk`} < x_k \mid \sigma_\gamma \mid x_{k`} \qquad (1.21)$$

Bu yerda $<\varphi_m \mid \varphi_{m`} >= \delta_{mm`}$ munosabat hisobga olingan. Bazis funksiyalari $\psi_n = \varphi_0 \chi_n (\chi_n = \alpha$ yoki β bo‘lgan faqat spin bo‘yicha aynigan zona uchun (1.8)ga mos (1.19) munosabatda quyidagicha bo‘ladi:

$$H = E_0 = e\varphi + \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha\beta}} \{\widehat{K}_\alpha \widehat{K}_\beta\}_{симм} + \mu_0 (\frac{1}{2} g_0 \hat{\vec{\sigma}} + \vec{L}) * \vec{B} \qquad (1.22)$$

Bu yerda

$$L^\alpha = -\frac{i}{m} \sum_{n`} \frac{P^\alpha_{on`} P^\beta_{n`o} \delta_{\alpha\beta\gamma}}{E_0 - E_{n`}} \qquad (1.22a)$$

Bunda

$$\sigma^\alpha_{nn`} =< x_n \mid \sigma_\alpha \mid x_{n`} >,$$
$$P^\alpha_{on`} P^\beta_{n`o} = \sum_{\substack{m_1 k_1 \\ m_2 k_2}} C^{n`}_{m_1 k_1} C^{n`*}_{m_2 k_2} P^\alpha_{om_1} P^\beta_{m_2 o} \delta_{k_1 k_2} \qquad (1.23)$$

Ko‘riniyaptiki (1.23) xad elektronlarning samaraviy g faktorga (1.20) ifodadagi har xil koordinatali va spinli holatlarning aralashishiga olib keluvchi spin – orbital o‘zaro ta’siri hisobiga yuzaga kelgan ulushini beradi. Aynimagan zonaning. $\psi_{n``} = \varphi_1 \chi_{k``}$ funksiyali holatlari L operatoriga o‘z ulushlarini qo‘sha olmaydilar (1.22a) ifodalardagi maxrajlarda spin-orbital ajrashishlarni hisobga olmasak, u holda, xuddi shuningdek, L operator nolga aylanadi.

Quyidagi samaraviy massa usulining kvantlashgan o‘racha va o‘ta panjaralarda spektrni hisoblashdagi qo‘llanilishini ko‘rib o‘tamiz. Agar modulyasiyalangan potensialni aralashmalarning zaryadlari xosil qilsa, u holda hisoblash usulining yagona qo‘llanilish sharti potensialning ravon bo‘lish shartidir. Agarda qaralayotgan E($\vec{k}$) zona tubining modulyasiyalanishi yarim o‘tkazgich tarkibini o‘zgarishi bilan bog‘liq bo‘lsa, u holda tarkibi keskin o‘zgaruvchi chegaralarda potensialning o‘zgarishi ravon bo‘lmay qoladi. Shuning uchun chegerada to‘lqin funksiyaga anchayin uzoqda joylashgan zonalardagi holatlar, panjara doimiysi tartibdagi masafadayoq yutiluvchi bo‘lsada, sezilarli ulushini beradi. Bunda egiluvchi funksiyalarga va ularning hosilalarini chegaraning o‘zidagina emas, balki chegaradan o‘ng yoki chap tomonda joylashgan qandaydir masofalarda o‘zaro bog‘laydi. Umuman olganda oddiy zonaviy yaqinlashishda ikki (A va B) qatlamlarning chegarasi yaqindagi sohalarda (z=± 0) F va $\partial F/\partial z$ kattaliklar o‘zaro

$$\begin{aligned} F_A &= t_{11}F_B + t_{12}\nabla_z F_\beta \\ \nabla_z F_A &= t_{21}F_B + t_{22}\nabla_z F_\beta \end{aligned} \tag{1.23}$$

ko‘rinishda chiziqli bog‘langandir; bunda

$\nabla_i = \dfrac{a}{m_{ii}}\dfrac{\partial F}{\partial z}$, $F_A = F_A(-0)$, $F_B = F_B(+0)$, $i = A, B$; m_A *ва* m_B A va B qatlamlardagi samaraviy massalar, a – panjara doimiysi. $J_z = \dfrac{\hbar a}{mi}(F_i^*\nabla_z F_i - (\nabla_z F_i^*)F_i$ oqimning doimiylik shartidan

$$t_{11}t_{22}^* - t_{12}^* t_{21} = 1 \tag{1.24v}$$

Bu shartni quyidagi ko‘rinishda qayta yozish mumkin:

$$\begin{aligned} m_A^\alpha F_A &= m_B^\alpha F_B \\ m_A^{-(1+\alpha)}\frac{\partial}{\partial z}F_A &= m_B^{-(1+\alpha)}\frac{\partial}{\partial z}F_B \end{aligned} \tag{1.24s}$$

Miqdoriy hisoblashlar α ning qiymati (-1/2)dan nolgacha o‘zgarishini ko‘rsatadi. Masalan o‘tkazuvchanlik zonasi uchun $\alpha = 1/4$, yengil kavaklar zonasi uchun $\alpha = 0$. Shuni qayd etish o‘rinliki, (1.24s) ifodadan kelib chiqadigan t_{11} va t_{22} larning faqat samaraviy massalarning nisbatiga bog‘liq deb chiqarilgan xulosa to‘la mazmun kasb etmaydi, chunki (1.24s) ifoda, aslida, (1.24v) ifodaning bir, qulay ko‘rinishi xolos. (1.23) ko‘rinishdagi chegaraviy shartlarni har xil, masalan, egiluvchi funksiyalar uchun ham yozish mumkin. Aynigan zonalar uchun, odatda, $F_A = F_B$

$$\frac{i}{\hbar}[\vec{r}H_A]F_A = \frac{i}{\hbar}[\vec{r}H_B]F_B \tag{1.25}$$

chegaraviy shartlar qo‘llaniladi, bunda $F_{A,B}$ - ko‘p komponenta (tashkil etuvchi)li funksiya bo‘lib, (1.16), (1.19) tenglamalarning yechimidir; $i[\vec{r}H]/\hbar$ operator tezlik operatori, impulslar fazasida $\vec{r} = i\partial/\partial\vec{k}$. Bu chegaraviy shart oqimning doimiyligini ta'minlaydi va α=0 bo'lgan (1.24v) (1.19)da $H(\vec{k})$ ikkinchi tartibli differensial tenglamalar tizimini tashkil etgandagina o'rinlidir. Keyn modeli uchun, ya'ni (1.19) ifoda faqat $\vec{k}$ bo'yicha chiziqli hadlargina noldan farqli hol uchun ham (1.22) tenglama qo'llaniladi; bunda samaraviy massalar va g faktorlar koordinataga bog'liq bo'lib qolishi e'tiborga olinadi. Bunday holda oddiy zonalar uchun kinetik energiya operatori

$$H_{\vec{k}} = -\frac{\hbar^2}{2} m^{\alpha} \nabla m^{-(1+2\alpha)} \nabla m^{\alpha} \tag{1.26}$$

ko'rinishda qayd etiladi; bu yerda ham (1.24s) ifodadagi kabi, α (-1/2)dan nolgacha qiymat qabul qiladi. Z=0 nuqtada joylashgan keskin geterochegara uchun yozilgan SHredinger tenglamasidan (1.26) munosabatga asosan

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} m^{\propto} \frac{d}{dz} m^{-(1+2d)} \frac{d}{dz} m^{\propto} F dz = \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{2}{\hbar^2} (V-E) dz = 0 \tag{1.27}$$

munosabat faqat $m^{\propto} F$ va $m^{-(1+2\propto)} \partial F / \partial z$ kattaliklar geterochegarada keskin o'zgaruvchi qiymatlarga ega bo'lmagandagina o'rinlidir. Bu isbotning mohiyatini orttirib yubormaslik kerak, chunki, yuqorida qayd etganimizdek, keskin geterochegaranig yaqinida ψ funksiyaga anchayin uzoqda joylashgan zonalar ham sezilarli ulushlarini berishi mumkin.

1.3. Invariantlar usuli

Hisoblashlarning samaraviy massa usulida $H(\vec{k})$ elektronlarning energetik spektrini va tashqi maydon ta'sirida ularning hatti-harakatlarini aniqlashda qo'l keladi; y $n_s \times n_s$ o'lchamli matritsadan iboratdir, n_s to'lqin vektori guruhi D tasavvurining o'lchamidir. Bu yerda $\vec{k}$ ning tashkil etuvchilari sifatida to'lqin vektori $\vec{k}$ ning tashkil etuvchilarini, shuningdek deformatsiya tenzori ε_{ij} ning yoki $\vec{\varepsilon}$ va $\vec{B}$ vektorlarning tashkil etuvchilari, yoyinki ularning keraklik ko'paytmalaridan tashkil topgan umumlashgan impulsning tashkil etuvchilari ham tushuniladi. $H(\vec{k})$

gamiltonianning shakl almashtirish simmetriyasiga nisbatan invariantligini e’tiborga olsak, u

$$D(q)H(_q^{-1}\vec{K})D^{-1}(q) = H(\vec{K}) \qquad (3.28)$$

shartni qanoatlantiradi, q –simmetriya elementlari. Agar (3.28) munosabat to‘lqin vektori guruhi $G\vec{k}$ elementlari uchun o‘rinli bo‘lsa, u holda qolgan q elementlarning hammasi uchun ham o‘rinlidir. Har bir (3.28) tenglama, aslida, $H(\vec{K})$ matritsa tashkil etuvchilari uchun yozilgan tenglamalardan iboratdir; agar D(q) matritsaning ko‘rinishi aniq bo‘lsa, bu munosabatlardan foydalanib $H(\vec{K})$ matritsani qurish mumkin, biroq bu hol, ko‘pgina hollarda D(q) tasavvurning xarakteri $\chi(g)$ ni bilgan holda amalga oshiriladi. Buning uchun H($\vec{K}$) matritsani K_i tashkil etuvchilarning ko‘paytmasi va n_s^2 ta chiziqli bog‘liq bo‘lmagan X$_i$ matritsalarning yig‘indisi ko‘rinishda yozamiz. Bu X$_i$ matritsalarni $F_{\vec{x}}$ yo‘nalishlar guruhining keltirilmaydigan D^{∞} tasavvuri bilan shakl almashuvchi matritsalar ko‘rinishida tanlashimiz mumkin, ya’ni

$$D(g)X_i^k D(g^{-1}) = \sum_i D_{ji}^{\infty} X_i^{\infty} \qquad (3.29)$$

tenglamani qanoatlantiradi. Bunda $H(\vec{K})D(g)D^*(g)$ ko‘paytmaga kiruvchi tasavvurlar bo‘yicha shakl almashuvchi X_i^{∞} matritsalarni o‘z ichiga oladi. Bunga asosan $H(\vec{K})$ gamiltonian D(g) tasavvur bo‘yicha shakl almashuvchi K_i^{∞} tashkil etuvchilarnigina o‘z ichiga olish mumkin va

$$H(\vec{K}) = \sum_{\infty} \alpha_{\infty} \sum_i X_i^{\infty} K_i^{\infty *} \qquad (3.30)$$

ko‘rinish oladi. (3.30) ifodada $X_i^{\infty} \text{ва} K_i^{\infty *}$ larning tanlashiga bog‘liq ravishda α_{∞} konstantalar $H(\vec{K})_{ij} = H(\vec{K})_{ij}^*$ - gamiltonianning ermitlik shartining ta’minlanishiga qarab haqiqiy yoki mavjud bo‘lishi mumkin. Shuningdek $H(\vec{K})$ ni qurishda gamiltonianning vaqt inversiya operatori $\vec{K}$ ga nisbatan invariantlik sharti xam e’tibordan chetda qoldirilmasligi kerak. Ma’lumki, $k_{i,} B_i$ va ularning toq sonli ko‘paytmalari vaqt inversiya operatoriga nisbaton toq bo‘lganligidan Y_i^x matritsalarni R operatorga nisbatan toq va juft bo‘lgan matritsalarga taqsimlaymiz.

Ravshanki, bir o‘lchamli tasavvurlar uchun $H(\vec{K})$ da faqat birlik tasavvur bo‘yicha shakl almashinuvchi $K_\propto$ tashkil etuvchilargina ishtirok etishi mumkin. Ikki karrali aynigan D $^\infty$ tasavvur uchun to‘rtta chiziqli bog‘lanmagan 2x2 o‘lchamli matritsalar sifatida birlik tasavvur bilan shakl almashuvchi 1-birlik matritsasi va $\left|D^\infty\right|^2$ da qolgan tasavvurlar bilan shakl almashuvchi uchta Pauli matritsalari $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ matritsalarni tanlash mumkin. Bunda, tabiiyki, K_i tashkil etuvchilarning hammasi haqiqiy deb hisoblangan. Bunda keltirilmagan tasavvurlar bilan shakl almashuvchi σ_i matritsalarning tanlovi ixtiyoriydir: har xil tanlov bazasining har xil unitar shakl almashtirilishlariga mos keladi. Agar $\left|D^\infty\right|^2$ kompleks qo‘shmalashgan $K_2 \text{ва} K_3 = K_2^*$ tashkil etuvchilar almashuvchi tasavvurlarni ham o‘z ichiga olsa, u holda $\hat{\sigma}_x \text{ва} \hat{\sigma}_y$ matirsalarning o‘rniga:

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) = \begin{vmatrix} 01 \\ 00 \end{vmatrix}, \sigma_- = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y)\begin{vmatrix} 00 \\ 10 \end{vmatrix} \qquad (3.30)$$

matritsalardan foydalanish maqsadga muvofiqdir.

Kelgusida kub panjarali kristalli yarim o‘tkazgichlarda (Ge,Si, GaAs) elektron va kavaklarning energetik spektrlarni topishning qisqacha izoxini keltirishdan avval kvantlashgan o‘rachali va o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlar (Ko‘YAo‘ va o‘PYAo‘) ning gamiltoniaanlari H($\vec{K}$)ni qurish usullariga qisqacha to‘xtalaylik; bunda o‘rachani yoki o‘ta panjaraning potensialini samaraviy massa usulida qayd etib uch o‘lchamli gamiltoniandan foydalanish mumkin. Bu holda ikki o‘lchamli sistema gamiltonianing kattaliklari taglik kristallining parametrlari orqali ifodalanadi. Bu usul shu bilan foydalidir. Boshqa tarafdan bir yo‘la qaralayotgan masalaning tabiatga, ya’ni tanlagan bazis funksiyalariga, mos holda ikki o‘lchamli H($\vec{K}$) gamiltonianni qurish mumkin; bunda, tabiiyki, bazis funksiyalar sirt yoki ikki davrli guruhlarning, tasavvurlari bo‘yicha shakl almashadi. Bunday holda K_i tashkil etuvchilar yo‘nalishlar guruhlarining, ya’ni sirt guruhlariga qarashli S_s, S_n S_{nv} nuqtaviy guruhlarning, mos keluvchi tasavvurlari bo‘yicha shakl almashadi.

Ayni paytda ikki o‘lchamli sistemalar –o‘lchamli kvantlashgan yarim o‘tkazgich larning materiali sifatida ruxli temirtosh tuzilmali – A_3B_5 yoki A_2B_6 birikmalar va olmos tuzilmali – Ge,Si va ularning qotishmalari ishlatiladi. Shu boisdan bunday yarim o‘tkazgichlarning zonaviy tuzilishiga qisqacha to‘xtalib o‘tamiz.

Ruxli temirtosh tuzilmali ko‘pgina yarim o‘tkazichlarning o‘tkazuvchanlik va valent zonalarining ekstremumlari Brilluen zonasining markazidagi G($\vec{k}=0$) nuqtada joylashgan. o‘tkazuvchanlik zonasi spin-orbital o‘zaro ta’sirini e’tiborga olmaganda $\vec{k}=0$ (G) nuqtada aynimagan va bu holatlarga mos kelgan to‘lqin funksiyasi G_1 tasavvur bo‘yicha shakl almashadi; agar spin e’tiboga olinsa, bu qaralayotgan holatlar ikki karrali aynigan va to‘lqin funksiyalari G_6 tasavvur bo‘yicha shakl almashadi.

G nuqtada valent zonasi spin e’tiborga olinmaganda uch karrali aynigan bo‘lib, to‘lqin funksiyalari G_{15} tasavvur bo‘yicha shakl almashadi; spin-orbital o‘zaro ta’sir hisobga olinsa valent zonasi to‘rt karrali aynigan G_8 va ikki karrali aynigan G_7 holatlarga ajraladi. G_8 zona esa $k \neq 0$ sohasida ikki: og‘ir va yengil kavaklarning tarmoqlariga ajraladi.

Agar zonalararo spin-orbital aralishishni hisobga olmasak G_6,G_7,G_8 holatlardagi elektronlarning to‘lqin funksiyalarini quyidagi ko‘rinishda tanlash mumkin G_6- holatlar uchun:

$$\psi_{c,\pm 1/2}^{(1/2)} = \propto_{\pm} S; \tag{3.31}$$

G_8- holatlar uchun esa:

$$\psi_{\pm 3/2}^{(3/2)} = \propto_{\pm} X_{\pm}, \psi_{\pm 1/2}^{(3/2)} = \propto_{\pm} \sum \sqrt{\frac{2}{3}} Z \pm \frac{\propto_{\pm}}{\sqrt{3}} X_{\pm} \tag{3.32}$$

G_7-holatlar uchun:

$$\psi_{\nabla,\pm 1/2}^{(1/2)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\propto_{\pm} Z \pm \sqrt{2} \propto_{\pm} X_{\pm} \right] \tag{3.33}$$

Bu yerda $X_{\pm} = (X_{\pm} iY)/\sqrt{2}, X, Y, Z - \Gamma$ nuqtadaga blox funksiyalari $U_{n\vec{k}}$ ning amplitudasi ; T_d guruh operatsiyalari-shakl almashtirishlarida (o‘zlarini) x,u,z koordinatalar kabi shaklan o‘zgaradi, S-to‘la simmetriyaviy funksiya, $\propto_{\pm}$- spinli ustunli matritsalar: $\propto_{+} = \propto = |\uparrow\rangle, \propto_{-} = \beta = |\downarrow\rangle$.

Kelgusida asosan G_8 valent zonasida kechadigan elektronli hodisalarni qarash maqsadimiz bulganligi sababidan ruxli temirtosh tuzilmali yarim o‘tkazgichlarning og‘ir va yengil kavaklarning energetik dispersiyasi va to‘lqin funksiyalari bilan qiziqamiz.

Oralik hisoblashlarni qiziqqan o‘qituvchining o‘ziga qoldirib elektronlar uchun samaraviy gamiltonianning matritsaviy ko‘rinishini quyida keltirib o‘tamiz

$$\widehat{H}(\vec{k}) = \begin{vmatrix} F & H & I & O \\ H^* & G & O & I \\ I^* & O & G & -H \\ O & I^* & -H^* & F \end{vmatrix} . \qquad (3.34)$$

Bunda

$$F = (A - B)k_z^2 + (A + \frac{1}{2}B)k_1^2, k_1^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad G = (A + B)k_z^2 + (A - \frac{1}{2}B)k_1^2,$$

$$H = Dk_z(k_x - ik_y),\ I = \frac{\sqrt{3}}{2}\left[B(k_x^2 - k_y^2) - \frac{2}{\sqrt{3}}Dik_xk_y\right].$$

Olmos tuzilmali - O_h simmetriyali yarim o‘tkazgichlar (Ge,Si)da ham $G_8^{\pm}$ zonalarga xos samaraviy gamiltonianning ko‘rinishi xuddi shuning kabi bo‘ladi. Biz bu yerda to‘lqin vektoriga nisbatan kvadratik hadlar bilan chegaralandik. Sferik yaqinlashishda, ya’ni $D = \sqrt{3}B$, (3.34) yanada soddalashadi; bunda elektronlarning energetik spektri

$$E_{1,2}(\vec{k}) = (A \pm B)k^2 \qquad (3.36)$$

ko‘rinishda bo‘ladi. A,V,D –zonaning parametrlari bo‘lib, Latinjenerning o‘lchamsiz $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ kattaliklari bilan $A = -\hbar^2\gamma_2 / 2m_0, D = -\hbar^2\gamma_3 / 2m_0$ munosabatlar yordamida ifodalangan.

1.1– jadval

Yarim o‘tkazgichlar	$-A\frac{2m_0}{\hbar^2}$	$-B(\frac{\hbar^2}{2m_0\hbar^2})^{-1}$	$-C\frac{2m_0}{\hbar^2}$	Yorug‘likni sindirish ko‘rsathichi
Ge	13,20	8,20	13,50	4,00
Si	4,22	1,0	4,78	3,44
GaAs	6,98	4,40	9,87	3,40
Ga	4,20	1,96	5,75	3,37

H($\vec{k}$) gamiltonianni diagonallashtiruvchi xususiy funksiyalarning ko‘rinishi:

$$F_{li} = [(E_i - F_i)(E_i - E_j)]^{-1/2}\tilde{F}_{li} \tag{3.37}$$

Bu yerda og‘ir va yengil kavaklar uchun

$$\tilde{F}_{li} = \begin{vmatrix} H \\ E_i - F \\ O \\ I^* \end{vmatrix}, \qquad \tilde{F}_{2i} = \begin{vmatrix} -I \\ -O \\ E_i - F \\ H^* \end{vmatrix}, (i, j = 1{,}2), \tag{3.38}$$

A_3B_5 birikmali ko‘pgina kristallarda $\gamma_2 в а \gamma_2$ kattaliklar qiymat jihatida bir-biriga yaqin, shu sababli sferik yaqinlashishdan ya’ni $\gamma_2 = \gamma_3 = \bar{\gamma} = \frac{1}{5}(2\gamma_2 + 3\gamma_3)$ munosabatdan foydalanish mumkin. Bunda

$$\mathrm{H}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[(\gamma_1 + \frac{5}{2}\bar{\gamma})1k^2 - 2\bar{\gamma}(\vec{J}\vec{K})^2\right] \tag{3.38}$$

Kavaklarning energiyasi esa

$$E_{1,2}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 \pm 2\bar{\gamma})k^2 \tag{3.39}$$

$$J_x = \sqrt{3}/2\begin{Vmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 2/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 2/\sqrt{3} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{Vmatrix}, \quad J_y = i\sqrt{3}/2\begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -2/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 2/\sqrt{3} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{Vmatrix},$$

$$J_z = \frac{1}{2}\begin{Vmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{Vmatrix} \quad . \tag{3.40}$$

T_α simmetriyali yarim o‘tkazgichlarda elektron va kavaklarning G6 va G8 zonalar uchun yozilgan samaraviy gamiltonianlari $\vec{k}$ ga nisbatan toq darajali hadlarini ham o‘z ichiga oladi. Bu esa o‘z navbatida ikki karrali ayniganlikni yo‘qotadi:

$$\begin{aligned} H_c^{(3)}(\vec{k}) &= \gamma_c(\vec{\sigma}\vec{\aleph}), \\ H_v^{(3)}(\vec{k}) &= \gamma_{vc}(\vec{J}\vec{\aleph}) \end{aligned} \tag{3.40}$$

$\gamma_c в а \gamma_v$ mos holda o‘tkazuvchanlik va valent zonalariga xos zona doimiyliklari, $x_\alpha = k_\alpha(k^2_{\alpha+1} - k^2_{\alpha+2})$. Gamiltonianning $\vec{k}$ ga nisbatan chiziqli hadlarining ko‘rinishi

$$\begin{aligned} H_c^{(1)}(\vec{k}) &= \frac{4}{3}k_c(\vec{k}\vec{V}^c), \\ H_v^{(1)}(\vec{k}) &= \frac{4}{3}k_v(\vec{k}\vec{V}^v) \end{aligned} \tag{3.41}$$

bo‘lib $V_\alpha^c = \sigma_\alpha(\sigma^2_{\alpha+1} - \sigma^2_{\alpha+2}), V_\alpha^v = J_\alpha(J^2_{\alpha+1} - J^2_{\alpha+2})$. Bu ifodalardan ko‘rinayaptiki H($\vec{k}$)- to‘la gamiltonianda «nodiagonal», biroq ham kvadratik ham chiziqli hadlarning mavjudligi $\vec{k} \neq 0$ holda ham $\Gamma_6 в а \Gamma_8$ zonalardagi holatlarning «o‘zaro ta’siri» - «aralashib ketgan»ligini anglatadi. Masalaning umumiyligini ta’minlash maqsadida G8 (G_8^+) zonaga $\vec{B}$ induksiyali tashqi magnit maydonining ta’sirini ham ko‘raylik. Bunda umumiy gamiltonian $H_{\vec{B}} = \mu_0 g_0\{k_B(\vec{J}\vec{B}) + \sum_i q_B J_i^3 B_i\}$ ko‘rinishdagi qo‘shimcha hadga ega bo‘ladi $k_B в а q_B$ - zonaviy parametrlar, g_0 – kavaklarning g – faktori.

Ko‘pgina hollarda, ayniqsa ta’qiqlangan zonasi kichik qiymatli, masalan InSb, yarim o‘tkazgichlarning zonaviy tuzilishini o‘rganishda $\vec{k}$ ga nisbatan kvadratik yaqinlashish yetarli bo‘lmay qoladi. Bu esa yaqin joylashgan zonalarning «o‘zaro ta’-sirini» e’tiborga olishni majbur etadi. Bunda $\vec{k}\ \vec{p}$ - usulida gamiltonianni qurishda har bir zonali alohida-alohida emas, balki hammasini birgalikda qarash zaruriyati tug‘iladi. Bunday modelni Keyne modeli deyiladi, xosil bo‘ladigan tenglamalarni, masalan sekulyar tenglamani, **Keyn tenglamasi** deyiladi. Bu holda to‘la to‘lqin funksiyasi

$$\psi = u / s > + \vec{v} \mid \vec{p} > \tag{3.43}$$

Bu yerda S va v_i lar spinorli funksiyalar: R_x=X, R_y=X, R_z=X, U va $\vec{V}$ lar ham spinorlardir. Samaraviy gamiltonianning umumiy ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$H(\vec{k}) = \frac{\hbar}{m}\vec{k}\vec{p} + \frac{1}{3}\Delta(\vec{J}\vec{\sigma}) \tag{3.44}$$

U holda H ψ ning chap tarafidan <S| yoki $<\vec{P}\,|$ spinorlarga ko‘paytirilib, so‘ngra olingan natijani integrallab u va $\vec{V}$ lar uchun quyidagi tenglamalar tizimini olamiz:

$$\begin{aligned} -i\hbar\partial u/\partial t &= -P(\vec{k}\vec{v}) \\ -i\hbar\partial\vec{v}/\partial t &= -E`g\vec{V} + P\vec{k}u + \frac{i}{3}\Delta\left[\vec{v}\right] \end{aligned} \tag{3.45}$$

Bu yerda $P = (\hbar/m) < S \mid P_z \mid Z >, E`_g = E_g + (\Delta/3) va < P_i \mid J._k \mid P_2 >= i\delta_{ikl}$ munosabat hisobiga olingan.

Statsionar holatlar uchun:

$$\begin{aligned} &Eu + P(\vec{k} * \vec{v}) = 0 \\ &(E + E`g)\vec{v} + \frac{1}{3}\Delta\vec{\lambda}\vec{v} - P\vec{k}u = 0 \end{aligned} \tag{3.46}$$

Bu yerda $\vec{\lambda}\vec{f} = -i[\vec{\sigma}\vec{f}\,]$ (3.46) tenglamaning har ikkala tarafiga $\vec{v}$ ni vektorial ko‘paytirib va $[\overline{\sigma}[\overline{\sigma}\vec{v}]] = 2\vec{v} + i[\overline{\sigma}\vec{v}]$ munosabatini e’tiborga olib

$$\frac{2}{3}\Delta\vec{v} + (E + E`_g + \frac{1}{3}\Delta)\vec{v}\lambda - P\lambda\vec{k}u = 0 \tag{3.47}$$

tenglamaga ega bo‘lamiz. (3.46v) va (3.47) tenglamalardan $\lambda\vec{v}$ ni ajratib $\vec{v}$ va u lar o‘rtasidagi munosabat ifodasini topamiz

$$\vec{v} = \frac{P}{3}\left[\frac{2}{E + Eg} + \frac{1}{E + Eg + \Delta}\right]\nabla^2 U = 0 \tag{3.48}$$

(3.48)ni (3.46) ifodaga qo‘yib U uchun

$$Eu+\frac{1}{3}P^2\left(\frac{2}{E+Eg}+\frac{1}{E+Eg+\Delta}\right)\nabla^2U=0 \tag{3.49}$$

tenglamani olamiz. Oxirgi tenglamadan $U=U_0*e^{i\vec{k}\vec{q}}$ ifodani hisobga olib $E(\vec{k})$ aniqlash imkonini beruvchi sekulyar (asriy) tenglamani olamiz

$$E=(E+Eg)(E+Eg+\Delta)-P^2k^2(E+Eg+\frac{2}{3}\Delta)=0 \tag{3.50}$$

Bu tenglamani $k^2=f(E)$ ko‘rinishda qayd qilib tenglamaning uch xil yechimga ega bo‘lamiz: G_6 zonasi E>0; G_8 zona: $Eg+\frac{2}{3}\Delta>-E>Eg;\Gamma_7$ zona $-E>Eg+\Delta$.

k^2 =f(E) munosabatning analitik ko‘rinishi aniq bo‘lsa $m^*(E)=\hbar^2/(\partial^2E/\partial k^2)$

$$m^*(E)=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial F}{\partial E}\right)^3\left[\left(\frac{\partial F}{\partial E}\right)^2-2F\frac{\partial^2F}{\partial E^2}\right]^{-1} \tag{3.51}$$

ifodani; holatlar zichligi massasi uchun esa

$$m_\alpha(E)=\frac{\hbar^2}{(2E)^{1/3}}(\pi^2\rho(E))^{2/3}=\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\sqrt{F(E)}}{\sqrt{E}}\frac{\partial F}{\partial E}\right]^{2/3}, \tag{3.52}$$

$\rho(E)=2(2\pi)^{-3}\int\delta[E(k)-E]d^3k$ holatlar zichligi.

k^4 aniqligiga energetik spektning ko‘rinishi

$$E(\vec{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\left[1-\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}E_g^{-1}\frac{3-2\eta+\eta^2}{3-\eta}\right] \tag{3.53}$$

Shunday qilib Keyn modelida o‘tkazuvchanlik zonasining tubidagi elektronning samaraviy massasi

$$\frac{1}{m^*}=\frac{1}{m_c}=\frac{2|P|^2}{3\hbar^2}\left(\frac{2}{Eg}+\frac{1}{Eg+\Delta}\right) \tag{3.54a}$$

G_8 zonadagi kavaklarning samaraviy massasi

$$\frac{1}{m_h}=\frac{2}{3}=\frac{|P|^2}{\hbar^2(\Delta+Eg)} \tag{3.54v}$$

elektron (g_c) va G_8 va G_7 zonalardagi kavaklar (k va g_v)ning g – faktorlari:

$$g_c = 2 - \frac{3}{4}\frac{m\Delta|P|^2}{\hbar^2 Eg(\Delta + Eg)} \tag{3.54g}$$

$$k = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\frac{m|P|^2}{\hbar^2 Eg} \tag{3.54d}$$

$$g_v = -\frac{2}{3} - \frac{4m|P|^2}{3\hbar^2(Eg + \Delta)} \tag{3.54e}$$

Keyn modeli, amalda InSb kabi tor zonali yarim o‘tkazgichlardagi tok tashuvchilarning energetik spektrlarini miqdoriy ifodalay oladi.

Endi to‘lqin funksiyalar uchun chegaraviy shartlarni keltirib chiqaraylik. Buning uchun (3.45) tenglamaning birinchisiga U* ni, ikkinchisiga esa V* ni ko‘paytiramiz. Xuddi shunningdek, (3.45) tenglamaga kompleks qo‘shma tenglamalarga mos holda (-U) va (-V) larni ko‘paytirib, hosil bo‘lgan to‘rtta ifodalarning chap va o‘ng tomonlarini alohida-alohida qo‘shib, so‘ngra spin indekslari bo‘yicha yig‘indi olib

$$\frac{\partial}{\partial t}(|u|^2 + |\vec{v}|^2) + Pdiv(u^*\vec{v} + u\vec{v}^*) = 0 \tag{3.55}$$

tenglamaga ega bo‘lamiz. Bu tenglama, o‘z navbatida, uzluksizlik tenglamasining aynan o‘zidir:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + div\vec{I} = 0 \tag{3.56}$$

bu yerdan

$$\vec{I} = P(u^*\vec{v} + u\vec{v}^*) \tag{3.57}$$

oqimning saqlanish sharti kelib chiqadi. Bu shart esa agar R_u^{α} $\textit{вa} P^{1-\alpha}V_n$ kattaliklar saqlanganda

$$P_A^{1-\alpha}V_{nA} = P_B^{1-\alpha}V_{nB}(P_A^{1-\alpha}V_{zA} = P_B^{1-\alpha}V_{zB}) \tag{3.58b}$$

bajariladi, $V_n - \vec{V}$ ning sirtga nisbatan normal tashkil etuvchisi $(v_n \equiv \vec{v}_z).P^{1-\alpha}v_z$ ning uzluksizligidan

$$P^{1-\alpha}\left\{\left[\frac{2}{E+Eg} + \frac{1}{E+Eg+\Delta}\right]\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\Delta[\vec{\sigma}\vec{k}]}{(E+Eg)(E+Eg+\Delta)}U\right\} \tag{3.59}$$

kattalikning ham uzluksizligi kelib chiqadi. Bundan E<<Eg shartda U uchun yozilan chegaraviy shartlar (3.23) munosabatga keltiradi; bunda $t_{11} = P^{\alpha}$, $t_{22} = P^{1-\alpha}, t_{12} = t_{21} = 0$. Bu shartlar (1.24s) shartdan $P^{\alpha}_{A,B} ни M^{\alpha}_{A,B}$ bilan va $m^{-1*\alpha}_{A,B} ни m^{-1}_{A,B} P^{-\alpha}$ bilan almashtirilishi bilan farq qiladi xolos. Bu yerda shuni ta'kidlash mumkinki, energetik tirqishsiz yarim o'tkazgichlar uchun ham yuqorida qayd etilgan fikrlarni qo'llash mumkin.

2- bob. KVANTLASHGAN O‘RACHALAR VA O‘TA PANJALARDAGI TOK TASHUVCHILARNING ENERGETIK SPEKTRI

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

Kelgusida dastlab oddiy o‘tkazuvchanlik zonasining elektronlari (faqat spinga nisbatangina ikki karrali aynigan hol) uchun o‘lchamli kvantlashish hodisasini qaray-lik: ularning energetik spektri va o‘lchamli kvantlashgan zonachalardagi samaraviy massalari, shuningdek to‘lqin funksiyalarining tabiati bilan qiziqamiz.

2.1-§. Oddiy zonali yaqinlashish

Kvantlashgan o‘racha va o‘ta panjaralardagi tok tashuvchilarning energetik spektrini har xil (asosan ikki xil) hisoblash usullari mavjud. Ularning birida kvant-lashgan o‘rachalar yoki o‘ta panjara spektrlari oddiy (yarim cheksiz) kristallarda qo‘l-laniladigan hisoblash usullar, masalan, kuchli yoki kuchsiz bog‘lanish usuli psevdo-potensial, ortogonallashgan yassi to‘lqin va boshqa usullarda maxsus kristall tuzilmasi (struktura) sifatida qaraladi. Bu hisoblash usullari, aslida ingichka davrli o‘ta panjaralar yoki ingichka, kvantlashgan o’rachalar energetik spektrini hisoblashda aslida, rasman, zaruriy hisoblash metodi bo‘lib, o‘rta yoki to‘siqlardagi atomli qatlamlar sonining ortishi bilan hisoblash hajmi (darajasi) orta (murakkablasha) boradi.

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

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

$$\sum_i \left[\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_{ii}} + V(z) - E \right] F(\vec{z}) = 0 \tag{2.1.1}$$

tenglamaning yechimi

$$F(\vec{ч}) = e^{i\vec{k}_1 \vec{ч}_1} y(z), \tag{2.1.2}$$

$V(z)$- kvantlashgan o‘racha (yoki o‘ta panjara), potensialning taqsimoti, z|| $\vec{n}, \vec{ч}_1 = \{x, y\} \perp \vec{n}$ potensial elektronnning zona tubidagi, ya’ni $\vec{k}_\perp$=0 nuqtadagi, energiyasini aniqlaydi. U aralashmalar, harakatlanuvchan zaryadlar yoki tashqi maydonning, shuningdek kristall tarkibi yoki tuzilishning o‘zgarishi hisobiga yuzaga keladigan potensiallarni o‘z ichiga oladi. a o‘lchamli, to‘g‘ri burchakli o‘racha uchun yozilgan to‘lqin funksiyasi o‘rachaning o‘rtasidan o‘tuvchi tekislikdagi akslantirishga nisbatan ma’lum juftlikka ega bo‘ladi va |z|<a/2 sohada uning ko‘rinishini quyidagi ko‘rinishda qayd etish mumkin:

$$\begin{aligned} \psi &= C_1 \cos kz (juft) \\ \psi &= C_1 \sin kz (toq) \end{aligned} \tag{2.1.3}$$

bu yerda z=0 o‘rachaning markaziga mos keladi,

$$k^2 = \frac{2m^A{}_{zz}}{\hbar^2}(E - E_\perp{}^A)$$
$$E_\perp = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}} \qquad (2.1.4)$$

E energiya o‘rachaning tubi (V(z)=0) dan hisoblanadi. a o‘lchamli, cheksiz chuqur o‘racha, ya’ni

$$V(z) = \{ \begin{matrix} 0 & agar & -a/2 < -z < a/2\,, \\ \infty & agar & |z| > a/2 \end{matrix} \qquad (2.1.5)$$

uchun juft holatlar uchun

$$k = \frac{\pi}{a}(2n+1), \qquad (2.1.6)$$

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

Chekli balandlikli (V_0) devorlar bilan chegaralangan o‘rtacha uchun, ya’ni

$$V(z)=V_0 \qquad (|z| > a/2) \qquad (2.1.6b)$$

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

Bunda

$$\lambda^2 = \frac{2m_{zz}^B}{\hbar^2}(V_0 - E - E_1^B), E_1^B = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}^B} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}^B} \qquad (2.1.7)$$

(2.1.24) chegaraviy shartlarda

$$\psi_A^{\propto}\psi_A = m_B^{\propto}\psi_B$$
$$m^{-(1+\propto)}\frac{d\psi_A}{d_z} = m^{-(1+\propto)}\frac{d\psi_B}{d_z}\,, \qquad (2.1.8)$$

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

$$tq\frac{kd}{2} = \frac{\lambda}{k}(\frac{m_A}{m_B})^{1+2\propto} \quad \text{-juft holatlar uchun;}$$

$$ctq\frac{kd}{2} = \frac{\lambda}{k}(\frac{m_A}{m_B})^{1+2\propto} \quad \text{-toq holatlar uchun,} \qquad (2.1.9)$$

$d = a + в$- o‘ta panjaraning (yoki kvantlashgan o‘rachaning) davri, $в$-to‘siqning kengligi.

Ma’lumki, to‘g‘ri burchakli o‘racha va to‘siqlar tizimidagi elektronlarning energetik spektri Kroning-Penni modeli yordamida aniqlash fanga dastlabki hisoblash usuli sifatida kirib keldi. Bunday davriy tizilmadagi qo‘shni o‘rachalardagi holat to‘lqin funksiyasi $\vartheta(z)$

$$\begin{aligned} \vartheta(z) &= C_1 \cos kz + C_2 \sin kz && 0 < z < a \\ \vartheta(z) &= C_3 \cos k(z-d) + C_4 \sin k(z-d) && d < z < d + a \end{aligned} \qquad (2.1.10).$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi; qaralayotgan o‘rachalar o‘rtasidagi to‘siqda esa-

$$\vartheta(z) = C_5 ch\lambda(z-a) + C_6 sh\lambda(z-a) \qquad d < z < d + в. \qquad (2.1.11)$$

Bu yerda k va λkoeffitsiyentlar (2.1.4) va (2.1.7) tenglamalar bilan aniqlanadi. (2.1.10) to’lqin funksiyalari (2.1.8) ko‘rinishdagi chegaraviy shartlardan tashqari Blox teoremasidan kelib chiqadigan$\vartheta(z+d) = \vartheta(z)e^{iqd}$-davriylik shartini xam qanoatlantiradi; bundan $C_3 = C_1 exp(iqd)$ va $C_4 = C_2 \exp(iqd)$ munosabatlarga ega bo‘lamiz. Natijada C_1, C_2, C_5, C_6 noma’lum koeffitsiyentlar ishtirokidagi to‘rtta tenglamalarning tizimini hosil qilamiz. Bu tenglamalar tizimining aniqlanuvchisi (diterminanti)ni nolga tenglashtirib $cosqd =$ G‘ (E, k_x, k_y)munosabatga ega bo‘lamiz; bunda

$$\text{G‘} = \cos ka \cdot ch\lambda в + \frac{1}{2}(R - R^{-1}) \sin ka sh\lambda в, R = \frac{\lambda}{k}\left(\frac{m_A}{m_B}\right)^{1+2\propto} \qquad (2.1.12)$$

Taqqoslab topish qiyin emaski, ushbu holdan Kroning-Penni modeliga $\lambda \to kR$ almashtirish bilan o‘tish mumkin. Energiyaning (2.1.11) tenglikni qanoatlantiruvchi ruxsat etilgan qiymatlar (q-haqiqiy qiymatlariga mos keluvchi) sohasi minizonalar deb yuritiladi; energiyaning ta’qiqlangan (2.1.11) tenglikni qanoatlantirmovchi) qiymatlar sohasi qning mavjud qiymatlar sohasiga mos keladi. Juft minizona tubining holati $k_x k_y = 0$da $F(E_n^0) = 1$ shart bilan, cho‘qqilarining holati esa $q = \pm \Pi / d$ $F(E_n^0) = -1$ shart bilan topiladi. Bunda minizonalarining tubi $q = \pm \Pi / d$, cho‘qqisi esa q=0 nuqtada mos keladi. Bunda minizonaning impulslar fazosidagi egrilik darajasini ifodalovchi kattalik-tok tashuvchilarning samaraviy massalari

$$m_{zz} = -\frac{\hbar^2}{d^2}\left[\frac{\partial F(E)}{\partial E_0}\right],$$
$$m_{ii} = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{(\partial F/\partial E)_0}{\partial^2 F/\partial k_i^2} \qquad (i = x, y)$$

Bu yerda hosilalar $k_x = k_y = 0$ *ва* $E = E_0$ shartlar e'tiborga olib olinadi.

(2.1.12) umumiy ko‘rinish ixtiyoriy davriy tuzilma (panjaralarga) uchun o‘rinli ekanini isbotlash qiyin emas. $|z| > d/2$ sohani egallangan yakka to‘siq $V(z)(V_{|z|<d/2} = 0)$ ning tiniqligi $t = |t|e^{i\delta}$ ifoda bilan aniqlansa, u holda bunday to‘siqlardan tashkil etilgan tizilma uchun (2.1.11) ifodadagi F:

$$F = \frac{1}{|t|}\left[\cos kd.\cos\delta + \sin kd \sin\delta\right] \qquad (2.1.14)$$

Bu holda yakkalangan to‘siqning tiniqlik koeffitsiyenti $r = \mp i(1-|t|^2)^{1/2}e^{i\delta}$ bo‘lib, Kronig-Penni modeli bo‘yicha $t = e^{-ik\text{в}}\left[ch\lambda\text{в} + \frac{i}{2}(R - R^{-1})sh\lambda\text{в}\right]^{-1}$. Endi ko‘p energetik sohali yarim o‘tkazgichlar uchun yuqorida qayd etilgan holni ko‘raylik. Agar tok tashuvchilarning energetik spektri ekstremumlari yaqini sohasida anizotrop (nojins) ekstremumlari sirtning normaliga nisbatan noekvivalent joylashgan bo‘lsa, u holda kvantlashgan o‘racha (o‘ta panjaralar)dagi har xil energetik sohalar uchun sathlarning holatlari ham har xil bo‘ladi: sohaning normali yo‘nalishda eng kichik qiymatli m_{zz} samaraviy massali sathlar eng pastkisi hisoblanadi. Masalan kremniyning (001) panjalarida bu ekstremumlar $\Delta(0,0,k_0)$ va $(0,0,-k_0)$; germaniy panjarasida –(111) ekstremum.

k_0 to‘lqin vektorining ekstremumni aniqlovchi ko‘ndalang tashkil etuvchilari kvantlashgan o‘racha (yoki o‘ta panjara)larda saqlanib qoladi. Masalan, $\vec{n}\|z$ o‘ta panjarada t_z davr a_0 dan dgacha o‘zgaradi, Brilluen minizonasining o‘lchamlari esa, mos holda bu yo‘nalishida $\pm\Pi/a_0$ dan $\pm\Pi/d$ gacha o‘zgaradi . Bunda k_{oz} nuqta minizonaning k'_{oz} nuqtasiga o‘tadi $k'_{oz} = k_{oz} - \nu 2\pi / d, \nu - k_{oz} / (\pi / d)$ nisbatning eng katta qiymati. Agar k_{oz} nuqta Brilluen zonasining chegarasida yotsa, ya’ni $k_{oz} = \pi / a_0$, u holda $d / a = 2n$ bo‘lsa $k'_{oz} = 0$, $d / a = (2n+1)$ bo‘lsa $k'_{oz} = \Pi / d$ qiymatlar qabul qiladi. Bu esa agar o‘ta panjara juft sonli elementar (oddiy) kataklardan tashkil topsa, k_{oz} nuqta minizonaning markaziga, agar – toq sonli elementar kataklardan tashkil topsa k_{oz} nuqta minizonaning chegarasida yotadi.

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

$$H = \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2m_{ij}} + V(z) \qquad (2.1.15)$$

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

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

$$\vartheta(z) = \exp\left\{ -i\left(\frac{m_{zz}}{m_{xz}} k_x + \frac{m_{zz}}{m_{yz}} k_y\right) z \right\} (C_1 e^{ikz} + C_2 e^{-ikz}), \qquad (2.1.16)$$

energiya esa

$$E = \frac{h^2 k^2}{2m_{zz}} + E_{\perp}, \; E_1 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}} + \hbar^2 (m_{xy}^{-1} + 2m_{zz} m_{xz}^{-1} m_{yz}) k_x k_y \qquad (2.1.17)$$

ko‘rinishda bo‘ladi.

(2.1.15) ifodaga asosan tezlik $V_z \vartheta = \frac{i}{\hbar} [H, \vartheta] = \frac{\hbar k}{m_{zz}} (C_1 e^{ikz} - C_2 e^{-ikz})$. Agar $\vartheta(z)$ va $V_z \vartheta(z)$ kattaliklar saqlangandagina chegarada tok tashuvchilar oqimining saqlanish sharti bajariladi. Bu esa $\infty = 0$ va $m_A = m_{zz}^A, m_B = m_{zz}^B$ munosabatli (2.1.8) chegaraviy shartga (2.1.24) ifodagi $t_{11}^{zz} = t_{22} = 1$ holga) mos keladi. SHuning m_{xz} va m_{yz} samaraviy massalar chekli chuqurlikli o‘racha va to‘siqlardagi (yoki $\infty = 0$ bo‘lgan o‘ta panjaralardagi) tok tashuvchilar uchun bir xil bo‘lsa (2.1.1) yoki (2.1.11), (2.1.12) (2.1.17) dagi $E_\perp$ ifodasidagi qo‘shimcha hadlar hisobga olingan holda) sekulyar tenglama saqlanib qoladi. Agar to‘lqin vektorining bittagina $k_{\perp 0}$ qiymatiga mos keluvchi ikki ekstremumlardagi energiyalar qiymatan yaqin bo‘lsa, u holda kvantli o’rachada (yoki o‘ta panjarada) bu sohalar holatlarining aralashuvi sodir bo‘ladi. SHunga o‘xshash aralashuv o‘racha va to‘siqlardagi ekstremumlarning pastkilari har xil $\vec{k}_0$ nuqtalarga mos kelgan hollarda ham sodir bo‘lishi mumkin. Shunga o‘xshash hol, masalan $GaAs - A\ell_x Ga_{1-x} As$ o‘ta panjaralarda (x>0,3)sodir bo‘lishi mumkin, $A\ell GaAs$da pastki ekstremum X nuqtalardan bittasida, GaAs da esa- G nuqtada joylashgan. Bunda X_1 va X_3 ekstremumlarning ajrlib energetik kengayishi yetarlicha katta emas va bu ekstremumlarga mos keluvchi eguvchi ξ_n va ξ_v funksiyalarning aralashib ketishi energiya minimal bo‘lgan nuqtaning-X nuqtaning (ma’lum masofaga) siljishiga olib keladi. X nuqta atrofidagi spektr quyidagi tenglamalar yordamida topiladi:

$$\left(E_u - \frac{\hbar^2}{2m_{zz}^x}\frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E\right)\xi_u - i\frac{\hbar}{m_0}P\frac{d}{dz}\xi_v = 0,$$

$$-i\frac{\hbar}{m_0}P\frac{d\xi_u}{dz} + (E_v - \frac{\hbar^2}{2m_{zz}^x}\frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E)\xi_v = 0,$$

bu yerda $P = \langle u|P_z|v\rangle$,u va v- mos xolda X_1 va X_3 nuqtalardagi blox funksiyalaridir. Hajmiy kristallarda $id\xi_{u,v}/dz = k\xi_{u,v}$ va

$$E = \frac{E_u + E_v}{2} \pm \left[\frac{(E_v - E_u)^2}{4} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^2}P^2\right]^{1/2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{zz}^x}, \qquad (2.1.19)$$

X_1 va X_2 zonalardagi funksiyalar va ularning birinchi tartibli hosilalari (A va V qatlamlar chegarasida) quyidagi munosabatlar yordamida bog‘langan [13]

$$\xi_i^B = \sum_i t_{11}^{ij}\xi_j^A + t_{12}^{ij}\nabla\xi_j^A \quad , \quad \nabla\xi_j^B = \sum_j t_{21}^{ij}\xi_j^A + t_{22}^{ij}\nabla\xi_j^A \qquad (2.1.20)$$

$(i, j = X_1, X_2)$. Qaralayotgan masalaning koʻlamini kengaytirish maqsadida quyida dastlab spinli kengayish, soʻngra energetik spektrining noparabolikligini hisobga olishi qarab chiqamiz.

Hajmiy kristallda, masalan T_d simmetriyali kristallarning G nuqtasi atrofida, oʻtkazuvchanlik (shuningdek valent) zonasining spinli kengayishi tok tashuvchilar $H(\vec{k})$ samaraviy gamiltonianida k^3 ga mutanosib hadning e’tiborga olinishi bilan bogʻlangan; kvantli oʻracha (yoki oʻrta panjaralar) da esa –k ga mutanosib. Samaraviy massa usulida <001> tizimli kvantli oʻracha uchun spinli kengayish «hadi» /9/ $H_{k_1} = -\beta(\delta_x k_x - \delta_y k_y)$, bunda $\beta = \gamma_c < k_z^2, < k_z^2 >=< \vartheta(z)|k_z^2|\vartheta(z) >$. <111> tizimli kvantli oʻracha uchun esa

$$H_{k_1} = \beta\left[\vec{\delta}\vec{k}\right]\vec{n} \qquad (2.1.22)$$

$\beta = \frac{2}{\sqrt{3}}\gamma_c < k_z^2 >$, $\vec{n}$ - boʻlim sirti devoriga tik birlik vektori. Umumiy simmetriyaviy mulohazalardan <001> tizilmalarda V(z) potensial inversiya markaziga ega boʻlmasa, u holda samaraviy gamiltonian $\left[\vec{\delta}\vec{k}\,\vec{n}\right]$ kabi hadga ham ega boʻlishi mumkin. Keyn modelida bunday had asimmetrik, masalan, oʻrachaning oʻng va chap tomonidagi qatlamlarning ta’qiqlangan zona va spin-orbital kengaygan zonalar kengliklari har xil boʻlgan, potensial oʻrachali tuzilmalarda yuzaga kelishi mumkin. Biroq, hisoblashlar koʻrsatadiki, bunday ulushlar. (2.1.21) yoki (2.1.22) kabi ulushlarga nisbatan $(GaAs - A\ell GaAs)$ tizilmali oʻrachalar uchun, hech boʻlmasa, bir necha oʻn marta kichik boʻladi. Oʻtkazuvchanlik yoki boshqa zonalar sathlarining aralashuviga olib keluvchi keskin chegaralarda samaraviy massa yaqinlashishining aniqlik darajasi sezilarli pasayadi. <111> tizilmalarda yuqorida qayd etilgan hol simmetrik V(z) potensialni oʻrachalarda ham β koeffitsiyentga oʻz ulushini beradi, chunki C_{3v} simmetriyaviy guruhda z ni-z ga almashtiruvchi element yoʻqdir. Bunday ulush xosil boʻlishining fizikaviy sababi <111> tizilmalarida oʻracha-tusiq tizimidagi qarama-qarshi chegaralari (fizik) tabiatining har xilligi boʻladi.

Yuqorida qayd etilgan ifodalarni keltirib chiqarishda o‘racha va to‘siqlardagi zonaning chetidan hisoblangan energiyasi mos kelgan ta’qiqlangan zona kengligidan kichik deb qabul qilingan.

Agar bunday shart bajarilmasa, u holda energetik spektrning noparabolikligini hisobga olish kerak bo‘ladi. Bu hol Keyn modelida sodda yechiladi. o‘tkazuvchanlik zonasidagi elektronlar uchun to‘lqin funksiyalarini (2.1.3), (2.1.6a,b) yoki (2.1.10) ko‘rinishda tanlanishi mumkin; bunda $C_i\alpha$ va $C_i\beta$ komponentali spinorlardir. Cheksiz chuqurlikli o‘racha uchun k avvalgidek (2.1.15) tenglama yordamida aniqlanadi, biroq k va E o‘rtasidagi

$$P^2(k^2 + k_\perp^2) = E(E+E+E_q)(E+E_q+\Delta)(E+E_q+\frac{2}{3}\Delta)^{-1} \qquad (2.1.23)$$

ko‘rinishdagi bog‘lanish mavjud bo‘ladi. Bu yerda ham, xuddi yuqoridagidek, E o‘racha o‘tkazuvchanlik zonasining tubidan boshlab hisoblanadi. Rasman (2.1.23) tenglama (og‘ir kavaklarning massasi cheksiz hisoblanganda) ham yengil kavaklarning, ham Γ_7^+ yoki G_6 valent zonasining spinli kengaygan (ajralgan) sathlarning spektrini beradi. Bunday holda $E - E_q > E > -(E_q + \frac{2}{3}\Delta)$ energetik oralikda olinishi kerak. Biroq og‘ir kavaklarning samaraviy massasi chekli olinganda yengil va og‘ir kavaklar holatlarning aralashuvini e’tiborga olmaslik mumkin emas.

Chekli chuqurlikli o‘rachalar (yoki to‘g‘ri burchakli o‘ta panjaralar) uchun spektrning noparabolikligini hisobga olishda chegaradagi har xil spinli holatlarning aralashuvini ham e’tiborga olish darkor. o‘rachaning ikki tarafdagi to‘siqlar bir xil energetik balandlikka ega bo‘lsa, u holda sathlarning holati ushbu tenglama yordamida aniqlanadi

$$2A_1A_2k\lambda\cos ka + (A_2\lambda^2 - A_1k^2)\sin ka - (B_1 - B_2)k_\perp^2 \sin kd = 0 \qquad (2.1.24)$$

Bu yerda

$$A_i = P_i^2 [(E+E_{qi}-V_i)^{-1} + (E+E_{qi}+\Delta_i - V_i)^{-1}],$$
$$B_i = P_i^2\Delta_i(E+E_{qi}-V_i)^{-1}(E+E_{qi}+\Delta_i - V_i)^{-1}$$

$i=1$-o‘rachaga, $i=2$- to‘siq uchun taaluqlidir (V_1=0 o‘racha uchun), k va E lar (2.1.23) ifoda orqali bog‘langan, λ va Elar – esa (2.1.23) ifoda k^2ni -λ^2 bilan, E ni E-V_2 bilan almashtirib xosil qilingan ifoda bilan bog‘langan, V_2- to‘siqning balandligi.

Bu yerda shuni ta’kidlash joizki, o‘ta panjaraning energetik spektrida noparabolik munosabatni hisobga olish hisoblashda analitik yechimga olib kelmaydi; shu sababli bu kabi masalalarning yechishda elektron-hisoblash mashinalari (EHM)ga murajaat etishni taqozo etadi.

2.2. Murakkab zonali yaqinlashish

Ushbu bandda qisqartirilgan (lekin ko‘pgina optik, tashish hodisalarni tushuntirishda yetarlicha aniqlik bilan qo‘l keluvchi) holda marakkab zonali yarim o‘tkazgichlardan xosil qilingan kvantlashgan o‘rachadagi kavaklarning energetik spektri va to‘lqin funksiyalar haqidagi asosiy tushunchalari bobida mulohaza yuritamiz.

Agar A_3B_5(yoki Ge,Si) yarim o‘tkazgichlardagi G_8 (Γ_8^+) zonasidagi kavaklar-ning valent zonasidan o‘tkazuvchanlik va spin-ajralgan zonasigacha bo‘lgan kichik bo‘lgan energiyalari bilan chegaralansak, u kavaklarning spektrini aniqlash imkonini beruvchi $\left\| H(\vec{k}) - E \right\| = 0$ sekulyar tenglama analitik yechilishi mumkin. <001> tizilmali cheksiz chuqurlikli, to’g‘ri burchakli o‘lchamli; kvantlashgan o‘rachalar uchun bunday tenglama dastlab Nedorezov, so‘ng Matulis va Piragas, Dyakonov va Xayetskiy, Merkulov, Perel va Portnoy, Andziani va b., Broydo va Chamlar tomonidan olingan.

Yuqorida qayd etilgandek, (2.1.34) yoki (2.1.38) ifoda bilan berilgan gamilton-li Shredinger tenglamasi yordamida (2.1.39) ifoda bilan berilgan energetik spektrning ikkita tarmog‘ini beradi; bu tarmoqlar (sferik yaqinlashishda) samaraviy massasi $m_1 = m_0/(\gamma_1 + 2\bar{\gamma})$, bo‘lgan – og‘ir kavaklar va samaraviy massasi $m_2 = m_0/(\gamma_1 - 2\bar{\gamma})$ munosabat bilan aniqlanuvchi yengil kavaklarning erkin harakatlanish sohalariga mos keladi $(\bar{\gamma} = \frac{1}{5}(2\gamma_2 + 3\gamma_3))$.

<001> tizilmali kvantlashgan o'racha uchun (2.1.34) (yoki (2.1.38) gamiltonianli Shredinger tenglamasining umumiy yechimini (egiluvchi $F_i(z)$ funksiyani) quyidagi ko'rinishda topish mumkin:

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

(2.1.25)

Bu yerda F_1 *ва* F_2 lar (2.1.37a) ifodalar bilan aniqlanadi, biroq F,N va J kattaliklar (2.1.35) ifodalar bilan berilgan bo'lib, <001> kvantlashgan o'racha uchun $H(-k_z) = -H(k_z) = H^*(k_z)$ I esa k_z ga bog'liq bo'lmagan kattaliklar, $k_m = k_{zm}(m = 1,2)$, k_{zm}- sekulyar tenglamaning yechimidir. Cheksiz chuqur o'rachaning to'siq devorlari $(z = \pm a/2)$ da (2.1.25) ifodaning har bir alohida-alohida olingan sathi nolga teng bo'ladi; bundan sakkizta $C_n^{(m)}$ noma'lum koeffitsiyentlar uchun sakkizta bir jinsli sakkizta tenglamalar tizimini hosil qilamiz. Bunday tenglamalar tizimining aniqlanuvchisini nolga tenglashtirib

$$\sin k_1 a . \sin k_2 a (|R_1|^2 + \tilde{\beta}^2 |R_2|^2 - 2\tilde{\beta} |I|^2) = (1 - \cos k_1 a .) 2\tilde{\beta} |H_1| . |H_2|, \qquad (2.1.26)$$

sekulyar tenglamani hosil qilamiz $(R = |I| + i|H), \lambda_m = \lambda(k_{zm}))$, $\tilde{\beta} = (E - F_1)/(E - F_2)$.

Masalaning to'laligini ta'minlash maqsadida Broido,Cham taklif etgan hisoblash usulini qisqacha keltirishni quyida qayd qilib o'tishni foydali deb topdik. Ular (2.1.34) matritsani qisman diagonallashtiruvchi

$$T = \begin{bmatrix} \varepsilon^* & 0 & 0 & -\varepsilon \\ 0 & \xi^* & -\xi & 0 \\ 0 & \xi^* & \xi & 0 \\ \varepsilon^* & 0 & 0 & \varepsilon \end{bmatrix} \qquad (2.1.27)$$

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

$$\tilde{H} = THT^{-1} = \begin{bmatrix} F & R & 0 & 0 \\ R^* & G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G & R \\ 0 & 0 & R^* & F \end{bmatrix} \tag{2.1.28}$$

ko‘rinishga keltirib, xususiy funksiyalarni sodda

$$\tilde{\Gamma}_1 = \begin{bmatrix} R \\ E-F \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tilde{\Gamma}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ E-F \\ \tilde{R} \end{bmatrix} \tag{2.1.29}$$

shaklga keltirishdi; bunda $\varepsilon = e^{i\vartheta} / \sqrt{2}, \ \xi = e^{in} / \sqrt{2}, \ \vartheta = I / |I,| \ \eta = H / |H|.$ Bu o‘rinda shuni ta’kidlash joizki, (2.1.28) gamiltonianning xususiy funksiyasi

$$\tilde{\vartheta}_i = \sum_j T_{ji} j = \sum_j T_{ij}^* \vartheta j \tag{2.1.30a}$$

yoki

$$\vartheta_{1,4} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|3/2 > e^{i\vartheta} \mp |-3/2 >_e^{-i\vartheta} \right], \ \tilde{\vartheta}_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|1/2 > e^{i\eta} \pm |-1/2 > e^{-i\eta} \right] \tag{2.1.30b}$$

ko‘rinishda bo‘ladi. U holda (2.1.29) tasavvurda (2.1.28)ning ko‘rinishini

$$F = \sum_{m=1,2} C_1^{(m)} \tilde{\Gamma}_e (k_m) e^{ikmz} + C_2^{(m)} \tilde{\Gamma}_e (-k_m) e^{-ikmz} \tag{2.1.31a}$$

ko‘rinishda qayta qayd qilish mumkin; bunda $\tilde{\Gamma}_e (\ell = 1,2)$ funksiyalarning biridir. SHunday qilib (2.1.26) tenglama bilan

$$2E = F_1 + G_1 - \left\{ (F_1 - G_1)^2 + 4|R_1|^2 \right\}^{1/2} = F_2 + G_2 + \left\{ (F_2 - G_2)^2 + 4|R_2|^2 \right\}^{1/2} \tag{2.1.31b}$$

tenglamalar birgalikda <001> tizimali kvantlashgan o‘rachadagi yengil va og‘ir kavaklarning energetik sathlarining joylashishini aniqlash imkonini beradi.

$\vec{k}_\perp = 0$ shartda (2.1.26) munosabatdan $k_1 a = \Pi n$, yoki $k_2 a = \Pi n$ va bularga mos holda aynigan valent zonasi uchun ikkita o‘zaro bog‘lanmagan sathlar to‘plamini olamiz:

$$E_2^{(n)} = E_{eh}^{(n)} = -(A+B)\Pi^2 n^2 a^{-2} \tag{2.1.32a}$$

- yengil kavaklar uchun va

$$E_1^{(n)} = E_{hh}^{(n)} = -(A-B)\Pi^2 n^2 a^{-2} \qquad (2.1.32b)$$

-og‘ir kavaklar uchun energiya qiymatlarini topamiz.

Shunday qilib bu holda erkin kavaklarning holatlari ikki o‘lchamli $\vec{k}_\perp = (k_x, k_y)$ to‘lqin vektor va zonachalar tartibi n yordamida xarakterlanadi. $\vec{k}_\perp = 0$ holda esa tizilmada momentining bosh o‘qi (z) ga tashkil etuvchisi $m = \pm 3/2$ bo‘lgan og‘ir kavaklar va $m = \pm 1/2$ bo‘lgan yengil kavaklarning o‘lchamli kvantlashgan holatlari aslo aralashmaydi va ularga $E_{hh}^{(n)}$ va $E_{\ell h}^{(n)}$ energiyali ikkita o‘zaro bog‘lanmagan hhn va ℓhn diskret energetik tizimlar mos keladi.

$\vec{k}_\perp = 0$ holatda esa, (2.1.26) va (2.1.31a) ifodalardan ko‘rinayaptiki, $m = \pm 3/2$ va $m = \pm 1/2$ holat to‘lqin funksiyalari o‘zaro aralashgan (bog‘liq) bo‘lib qoladi. Bu hol esa qaralayotgan masalaning yechimini murakkablashtiradi.

(2.1.26)ga asosan yengil va og‘ir kavaklarning satqlari uchun mos keluvchi ko‘ndalang samaraviy massalarning ko‘rinishlari quyidagicha bo‘ladi:

$$\frac{m_0}{m_\ell^{(n)}} = \frac{2}{\hbar^2}\left[\frac{B(A-\frac{1}{2}B)+D^2}{B} + siqn(\frac{1}{2}A-3B)x\frac{D^2(A^2-B^2)^{1/2}}{B^2}\frac{(-1^{n+1}+\cos(\pi n\phi^{-1})}{\pi n Sin(\pi n\phi^{-1})}\right], \qquad (2.1.33a)$$

$$\frac{m_0}{m_h^{(n)}} = \frac{2}{h^2}\left[\frac{B(A-\frac{1}{2}B)+D^2}{(-B)} + siqn(\frac{1}{2}A-3B)x\frac{D^2(A^2-B^2)^{1/2}}{B^2}\frac{(-1)^{n+1}+\cos(\pi n\phi)}{\pi n\sin(\pi n\phi)}\right] \qquad (2.1.33b)$$

bu yerda $\phi = [(A-B)/(A+B)]^{1/2}$.

(2.1.26) ifodani yanada qulayroq ko‘rinishda

$$2\tilde{\beta}.tq(k_1 a/2).ctq(k_2 a/2) = (\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 1})|H_1||H_2| \qquad (2.1.26a)$$

ham qayd etish mumkin,

$$\lambda = 2\tilde{\beta}|1|^2 - |R_1|^2 - \tilde{\beta}^2|R_2|. \qquad (2.1.34)$$

Bu ifoda sferik yaqinlashishda quyidagi ko‘rinishni oladi

$$\lambda_0 = B^2 \left[k_\perp^4 + k_\perp^2 (k_1^2 + k_2^2) + k_1^2 k_2^2 \right]^{1/2} \qquad (2.1.34)$$

(2.1.26a) ifodadagi ikki ishora E($k_\perp$) bog‘lanishning ikki har xil egri chiziqlarga mos keladi (2.1.26a) ifodada pastki ishora tanlansa yengil kavaklarning juft tartibli, og‘ir kavaklarning esa toq tartibli tarmoqlarini beradi, yuqorigi ishora tanlansa-aksincha.

2.1-rasmda arsined galliy valent zonasidagi kavaklarning o‘lchamli kvantlashishning energetik dispersiyasi keltirilgan (sferik yaqinlashish).

Yuqorida <001> tizilmali o‘racha (yoki o‘ta panjara) lar haqida muhokama qilinadi. Endi esa munozarani <111> tizilmali o‘rachalarga bo‘laylik. Bunda $z \parallel [111],\ x \parallel [1\bar{1}0],\ y \parallel [11\bar{2}]$ ko‘rinishdagi koordinatalar tizimining tanlanishi hisoblashlarni anchayin soddalashtiradi. U holda Lattinjer-Kon gamiltonianning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \begin{aligned} & \gamma_1 k^2 + \gamma_3 (J_z^2 - \tfrac{5}{4}\hat{1})(k^2 - 3k_z^2) - \frac{1}{3}(\gamma_2 + 2\gamma_3)(J_+^2 k_-^2 + J_-^2 k_+^2) + \\ & + \frac{2}{3}(\gamma_2 - \gamma_3) \left[J_+^2 k_+ + J_-^2 k_- \right] k_z + \\ & + \sqrt{2}(\{J_z J_+\} k_+^2 + \{J_z J_-\} k_-^2)] - \frac{2\sqrt{2}}{3}(2\gamma_2 + \gamma_3) k_z (\{J_z J_-\} k_- + \{J_z J_+\} k_+) \end{aligned} \right\}$$

(2.1.35)

Bu ifodada $J_\pm = J_x \pm iJ_y, k_\pm = (k_x \pm ik_y)/\sqrt{2}$. Agar H-gamiltonianni (2.1.34) matritsa ko‘rinishida tavsirlasan, u holda uning matritsa elementlarining ko‘rinishini quyidagicha tavsiflash mumkin:

$$F = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\gamma_1 k^2 + \gamma_3 (k^2 - 3k_z^2)\right], \quad G = \frac{\hbar^2}{m}\gamma_1 k^2 - F, \quad H = -\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{2}{3}}\left[(\gamma_2 + \gamma_3) k_z k_- - (\gamma_2 - \gamma_3) k_+^2\right],$$

$$I = -\frac{\hbar^2}{m\sqrt{3}}\left[(\gamma_2 + 2\gamma_3) k_-^2 - 2(\gamma_2 - \gamma_3) k_+ k_z\right].$$

(2.1.36)

Bu holda ham kavaklarning to‘lqin funksiyalarini (2.1.26) ko‘rinishida tanlash mumkin, biroq ushbu holda I parametr, <001>tizilmadan farqli o‘laroq, k_z ga bog‘liqdir. Ayni shu holat kavaklarning energetik spektrini ushbu hol uchun Broido va Choi usulini-gamiltonianni qisman diagonallashtirish usulini qo‘llash mazmunsizdir, ya’ni sekulyar tenglamaning tartibini pasaytirish mumkin emas. Agar oxirgi ikki ifodada $\gamma_2 = \gamma_3$ deb hisoblasak qator ishlarda taklif etilgan shakl almashtirishni amalga oshirish mumkin; kavaklarning spektri<001> tizilmadagi kavaklar spektri ifodalari yordamida aniqlanadi (F,H,Ilarning farqini unutmagan holda). Hisoblashlarda, boshqacha, ya’ni koordinatalar tizimini $x \| \vec{n}, y \perp \vec{k}_\perp$ kabi tanlab (k_z=0 deb tanlab) G‘ ustun matritsalardan tashkil topgan tenglamani soddalashtirish mumkin: bunga mos kelgan va $C_{I,2,3,4}{}^{(m)}$ koeffitsiyentlar uchun yozilgan tenglamalar tizimidan

$$\lambda_0 \sin k_1 a . \sin k_2 a = \frac{3}{2} B k_\perp^2 k_1 k_2 (\cos k_1 a . \cos k_2 a - 1) \qquad (2.1.37)$$

sekulyar tenglamani olamiz; $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \ell h E - k_\perp^2, k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} hhE - k_\perp^2, m_{hh}, m_{\ell h}$ - mos xolda ogir va yengil kavaklarning hajmiy samaraviy massalari: $m_{hh} = m/(\gamma_1 + 2\bar{\gamma}), m_{\ell h} = m/(\gamma_1 - 2\bar{\gamma})$.

Bunday yaqinlashishda $\vec{k}_\perp = 0$ shartda energetik sathlarning joylashishi

$$E_{\ell h}^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1 + 2\bar{\gamma}) \frac{\pi^2 n^2}{a^2} \qquad (2.1.38a)$$

yengil kavaklar uchun; og‘ir kavaklar uchun esa

$$E_{hh}^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1 - 2\bar{\gamma}) \frac{\pi^2 n^2}{a^2} \qquad (2.1.38b)$$

ifodalar yordamida topiladi.

Kavaklarning ko‘ndalang samaraviy massalari

$$\frac{1}{m_{hh}^{(n)}} = \frac{1}{m_{hh}} + 3\sqrt{m_{\ell h}^{-1} m_{hh}^{-1}} \frac{(-1)^{n+1} + \cos(\pi n \sqrt{m_{\ell h} / m_{hh}})}{\pi n . \sin(\pi n \sqrt{m_{\ell h} / m_{hh}})} \qquad (2.1.39a)$$

$$\frac{1}{m_{\ell h}^{(n)}} = \frac{1}{m_{\ell h}} + \frac{3}{\sqrt{m_{\ell h} m_{hh}}} \frac{(-1)^{n+1} + \cos(m_{hh} / m_{\ell h})}{\pi n \sin(\pi n \sqrt{m_{hh} / m_{\ell h}})} \qquad (2.1.39b)$$

Xususan $m_{\ell h} \ll m_{hh}$ shart uchun og‘ir kavaklar uchun birinchi energetik sathda

$$\frac{1}{m_{hh}^{(1)}} = \frac{1}{2m_{hh}} + \frac{6}{\pi^2} \frac{1}{m_{\ell h}} \quad . \qquad (2.1.38)$$

Bu bandning ilovasida chekli balandlikka ega bo‘lgan potensial to‘siqli o‘racha uchun shu xusus hisoblashlar juda murakkab. Shu boisdan bu kabi masallar EHM yordamida xal etiladi, shu sabab bu yerda to‘xtalib o‘tmaymiz.

Endi qisqacha spinli o‘zaro ta’sirga e’tibor nimaga olib kelishini analiz qilaylik. <001> va <111> kvantlashgan o‘racha (yoki o‘ta panjara) larda (T_d simmetriyaviy guruhli yarim o‘tkazgichlar uchun) valent zonasida kavaklarning efektiv gamiltonniani $\vec{k}_\perp$ ga nisbatan chiziqli hadlarni ham o‘z ichiga oladi. Yuqorida qaralgan geometriyada samaraviy gamiltonianda k_z ga nisbatan had bo‘lmaydi. yengil va og‘ir kavaklarga mos keluvchi gamiltonianlarning ko‘rinishi (2.1.21) yoki (2.1.22) ko‘rinishda bo‘ladi (xuddi o‘tkazuvchanlik zonasidagi elektronlarniqiga o‘xshash).

2.3. O‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarda elektronli holatlar

Odatdagi nazariy hisoblashlarda, masalan o‘ta panjaralarni hosil qilinish yo‘nalishida yuzaga keladigan lokallashgan elektronli hrolatlarni hisoblashlarda potensil to‘siqlarning o‘rachaga nisbatan o‘ng va chap balandliklari bir xil deb olinadi. SHuningdek nuqsonlar hosil bo‘lga sohaning l uzunligi $(a+b)$ uzunlikka karrali emas deb tasavvur qilinadi; $a\,(b)$ - o‘racha(potensial to‘siq)ning kengligi. Bunday tizilmalar simmetrik tizilmalar deb yuritiladi.

Quyida kvantlashgan o‘ra va potensial to‘siqlarning davriy takrorlanishidan hosil bo‘ladigan tizimda elektron lokallashgan holatlarning hosil bo‘lishini nazariy jihatdan tekshiraylik. Bunda kvantlashgan o‘rachaning ikki tarafidagi energiyaviy balandliklari ikki xil bo‘lsin, ya’ni nosimmetrik kompozitsion o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichni qaraylik. Umuman olganda, davriylikning buzilishi nafaqat potensial to‘siqlarning balandliklariga nisabatan, balki potensial to‘siqlar qalinliklarining har xilligiga nisbatan ham bo‘lishi mumkin (1-rasm). Masalani to‘la hal etish maqsadida a qalinlikli kvantlashgan o‘ra va b qalinlikli potensial to‘siqlarning davriy joylashishidan tashkil topgan, shuningdek tok tashuvchilarining samaraviy massalari m, m_1, m_2 ularning Oz o‘qi bo‘lab harakatini o‘ng tomondan U_1 va chap tomondan

U_2 balandlikli potensial to‘siqlar chegaralab tursgan kompozitsion o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichni ko‘raylik. Bunda yx tekisligi bo‘ylab kristall bir jinsli va tok tashuvchilarni Blox elektronlari sifatida qarash mumkin, ya’ni o‘ta panjarali tizilma Oz o‘qi bo‘yicha joylashgan. U holda samaraviy massa hisoblash usuliga asoslansak statsionar SHredinger tenglamasining yechimini

$$\psi(x,y,z) = \psi(z)\exp[ik_x + ik_y y] \tag{3. 1}$$

ko‘rinishda izlaymiz; $\vec{k}_\perp = \{k_x, k_y\}$ xy tekisligida yotuvchi to‘lqin vektoridir.

Oxirgi tenglamadan ko‘rinayaptiki, SHredinger tenglamasining xusuiy yechimi U(z) skalyar potensialning geometrik ko‘rinishiga bog‘liq. Bunda SHredinger tenglamasi yechimi ($\psi(z)$ funksiyasiga) Bastardning [4]

$$\psi_л = \psi_п, \left(m^{-1}(z)\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)_л = \left(m^{-1}(z)\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)_п \tag{3. 2}$$

chegaraviy shartlarini qo‘llaymiz. Bu yerda «l» va «p» - chegaraviy sohaga nisbatan mos holda chap va o‘ng ma’nolarini anglatadi.

Shredinger tenglamasining yechimini quyidagi

$$U(z) = \begin{cases} U_1 & agar \quad z < -a/2 \quad , \\ 0 & agar \quad -(a/2) \le z \le a/2 \ , \\ U_2 & agar \quad z > a/2 \end{cases} \tag{3. 3}$$

potensialga nisbatan

$$\psi(z) = \begin{cases} A_1 e^{-x_1 z} & agar \quad z > a/2, \\ A\sin(kz+\alpha) & agar \quad -(a/2) \le z \le a/2, \\ A_2 e^{-x_2 z} & agar \quad z < -a/2 \end{cases} \tag{3. 4}$$

ko‘rinishda izlaymiz, bunda

$$x_{1,2} = [k_\perp^2 + 2m_{1,2}(U_{1,2} - E)\hbar^{-2}]^{1/2},$$
$$k = (2mE\hbar^{-2} - k_\perp^2)^{1/2}$$

belgilashlar kiritilgan.

Kelgusida (3. 4) munosabatni e’tiborga olib va (3.2) chegaraviy shartni qo‘llab A_1, A_2, A integrallash doimiyliklariga nisbatan yozilgan tenglamalar sistemasidan olingan aniqlovchiga ega bo‘lamiz

$$\left\| \begin{matrix} \gamma_2 \cos\dfrac{ka}{2} + \sin\dfrac{ka}{2}\gamma_2 & \sin\dfrac{ka}{2} - \cos\dfrac{ka}{2} \\ \sin\dfrac{ka}{2} + \gamma_1 \cos\dfrac{ka}{2} & \cos\dfrac{ka}{2} - \gamma_1 \sin\dfrac{ka}{2} \end{matrix} \right\| = 0 \tag{3. 5}$$

Bu ifodada $\gamma_{1,2} = \dfrac{km_{1,2}}{mx_{1,2}}$. (3. 5) munosabatdan:

$$\left[1 - \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2 \frac{k^2}{x_1 x} \right] tgka + 2\frac{m_2}{m_1} k(x_1^{-1} + x_2^{-1}) = 0 \tag{3. 6}$$

Oxirgi ifoda qaralayotgan tizimning energetik spektrini anglatadi. Tabiiyki, bu munosabat EHMda yechiladi va to‘lqin vektorining ikki: trigonometrik va chiziqli tenglamalarni bir vaqtda qanoatlantiradigan qiymatlarigina fizikaviy ma’noga ega. Energiyaning bunday - noldan farqli qiymatlarining mavjudligi aniq bir energiyali va elektronlar lokallashadigan energetik holatlarning yuzaga kelishligidan dalolat beradi.energiya. Bunday holatlar o‘ta panjarali yarim o‘tkazgichlarda nosimmetriklik yoki nojinslilik[1] e’tiborga olinganda yuzaga kelishi mumkinligini isbotladik. Bu hol, tabiiyki, tizilmaning ko‘pgina, xususan, optik xusuiyatlarini alohida e’tibor bilan tekshirishni talab etadi, chunki bunday hollarda optik o‘tishlarning odatdagi kanallaridan tashqari o‘lchamli lokallashgan ushbu energetik holatlar orqali ham kechishiga, ya’ni bunday holatlarning optik o‘tishlarga qo‘shadigan ulushlariga ham, albatta, e’tibor qaratishni talab etadi.

Elektronlar lokallashi mumkin bo‘lgan energetik holatlarning E energiyasini umumiy holda hal etish maqsadida to‘lqin funksiyalar uchun

$$\psi_1(z + (a+b)) = e^{-\tilde{k}_1(a+b)}\psi(z), \qquad \psi_2(z - a - c) = e^{+\tilde{k}_2(a+c)}\psi(z) \tag{3. 7}$$

[1] Kristall tizilmasidagi nъsimmetriklikni nuqsъn sifatia qarash mumkin.

ko‘rinishda davriylik shartlarini qayd qildik. Bu holda $\psi = k^{-1}\dfrac{\partial\psi}{\partial z}, \psi_n = \dfrac{m_n}{m_n^k}\dfrac{\partial\psi_n}{\partial z}$; n – qatlamlarning tartib raqami; $\tilde{k}_{1,}\tilde{k}_2$ kattaliklar quyidagi

$$
\begin{aligned}
ch\tilde{k}_1(a+b) &= \cos ka * chx_1 b + (\eta_1 - \eta_1^{-1})\sin ka * shx_1 b/2 \\
ch\tilde{k}_2(a+c) &= \cos ka * chx_2 c + (\eta_2 - \eta_2^{-1})\sin ka * shx_2 b/2
\end{aligned}
\tag{3. 8}
$$

dispersion tenglamalarni qanoatlantirdi.

Kelgusida, odatdagidek, eng pastki minizonaning pastida joylashishi mumkin bo‘lgan elektronli energetik holatlarni nazariy tahlil etamiz. Bunday holda (3. 8) tenglamaning, alohida olingan, chap qismi birga teng va tenglama haqiqiy yechimlarga ega bo‘ladi. Hisoblashlarni soddalashtirish maqsadida o‘lchamsiz $\widehat{t}_i^{(mn)}$ o‘tish matritsasini kiritaylik. Uning yordamida (ψ_m, φ_m) va $(\psi_n \varphi_n)$ $\left(-\dfrac{a}{2}, +\dfrac{a}{2}\right)$ sohada yotgan birinchi qatlamga nisbatan o‘zaro bog‘lanish tabiatini topish imkonini beradi. U holda $\widehat{t}_A^{(AA)}$ *ва* $\widehat{t}_A^{(B_2B_1)}$

$$
\widehat{t}_A^{(AA)} = \begin{bmatrix} \cos ka & \sin ka \\ -\sin ka & \cos ka \end{bmatrix}, \tag{3. 9}
$$

$$
t_A^{(B_2B_1)} = \begin{bmatrix} t_{11}t_{12} \\ t_{21}t_{22} \end{bmatrix}, \tag{3. 10}
$$

bunda

$$
\begin{aligned}
t_{11} &= \beta_+ \cos\alpha_1 \cos\alpha_2 + \beta_- \sin\alpha_1 \sin\alpha_2, \\
t_{12} &= \frac{m_1}{m_A}\frac{k_1}{k}(\beta_- \sin\alpha_2 \cos\alpha_1 - \beta_+ \sin\alpha_1 \cos\alpha_2), \\
t_{21} &= k_2 m_A(\beta_- \sin\alpha_1 \cos\alpha_2 - \beta_+ \cos\alpha_1 \sin\alpha_2)/(m_2 k), \\
t_{22} &= k_2 m_1(\beta_+ \sin\alpha_1 \sin\alpha_2 + \beta_- \cos\alpha_1 \cos\alpha_2)/(m_2 k_1),
\end{aligned}
$$

$\beta_\pm = (A_2 \pm B_2)/(A_1 \pm B_1), \alpha_n = k_n \alpha_n; \alpha_n$ - A yarim o‘tkazgich koordinatalar markazidan B yarim o‘tkazgichning qaralayotgan nuqtasigacha bo‘lgan masofani anglatadi; $ik_{1,2}=x_{1,2}$. Hisoblashlarda

$$
\det(t_A^{(B_2B_1)}) = \frac{m_1}{m_2}\frac{k_2}{k_1}\beta_+\beta_-. \tag{3. 11}
$$

ekanini qayd qilish juda o‘rinlidir. Agar $t^{(mn)}$ matritsa

$$\begin{bmatrix} \psi_m(z_m) \\ \varphi_m(z_m) \end{bmatrix} = t^{(mn)} \begin{bmatrix} \psi_m(z_m) \\ \varphi_m(z_m) \end{bmatrix} \tag{3. 12}$$

munosabatni qanoatlantirsa, u holda lokallashgan holatlarning energiyasini aniqlash imkonini beruvchi

$$W_m(z_m) = \frac{t_{21}^{(mn)} + t_{22}^{(mn)} W_n(z_n)}{t_{11}^{(mn)} + t_{12}^{(mn)} W_n(z_n)} \tag{3. 13}$$

munosabatga olib keladi. Oxirgi ifodada $W_n(z_n) = \varphi_n(z_n)\psi_n(z_n)$. U holda AV va VA qatlamlardagi kattaliklar o‘zaro

$$\begin{aligned} W_{AB} &= \frac{\cos ka - chx_1 b * \exp(\tilde{k}_1(a+b))}{\sin ka + \eta_1^{-1 shx_1 b \exp}(\tilde{k}_1(a+b))} \\ W_{BA} &= \frac{\cos ka - shx_2 c * \exp[-\tilde{k}_2(a+c)]}{\eta_2^{-1} \sin ka + chx_2 c * \exp[-\tilde{k}_2(a+c)]} \end{aligned} \quad , \tag{3. 14}$$

munosabatlar yordamida aniqlanadi $\eta_{1,2} = mx_{1,2} / km_{1,2}$.

Xulosalar

1. Yarim o‘tkazgichlarda tok tashuvchilar-o‘tkazuvchanlik zonasida elektronlar, yoyinki valent zonasida kavaklarning konsentratsiyasi (hajmi birligidagi soni) metalldagi elektronlar konsentratsiyasiga nisbatan anchayin kichik va ular o‘z zonalarida kichik energiyali holatlarni egallagan bo‘ladi. Shu sababli kristalli yarim o‘tkazgichlardagi tok tashuvchilarning energetik spektrini hisoblashlarda qaralayotgan zonaning ekstremumi – yuqori simmetriyali nuqtalariga nisbatan kichik energetik oraliklari bilan chegaralanish kifoya.
2. Tok tashuvchilarning ekstremum nuqtalari yaqin sohalardagi energetik spektrini hisoblash uchun, asosan, uch usul: ***kp***- usul, samaraviy massa usuli va invariantlar usuli qo‘llaniladi. Amalda ushbu ikki usul ham simmetriya tasavvurlariga asoslangan, chunki energetik spektrning umumiy ko‘rinishigina ahamiyatlidir.
3. Agar kristall izotrop va bir jinsli bo’lsa, u holda energiyaviy spektr, ya’ni energiya (E) va impuls (p) o’rtasidagi bog’lanishi $E(p)=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ bo’ladi; $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ -kvazizarraning impulsi, $\vec{k}$ -uning to’lqin vektori; $|\vec{k}|=2\pi/\lambda$, λ -to’lqin uzunligi, $\hbar=h/2\pi=1{,}01\cdot10^{-34}$ $Ж\cdot c$, m -kvazizarraning massasi. Umuman olganda, kristallar anizotrop muhitdir, chunki kristallning ikki xil yo’nalishi fizikaviy noekvivalentdir. Bunday holda energiyaviy dispersiyaning ko’rinishi murakkablashadi.
4. Agar yarim o‘tkazgichli qatlamlarning qalinligi elektronlar yoki kavaklarning de-Broyl to‘lqin uzunligidan kichik bo‘lsa, u holda elektron va kavaklar kvazi-ipulsining sirtlarga tik bo‘lgan tashkil etuvchisi o‘lchamli kvantlashib qoladi. Bunday o‘lchamli kvantlashish tok tashuvchilar spektridagi har bir zonaning ikki o‘lchamli zonachalarga ajralishiga olib keladi.
5. Kvantlashgan o‘racha va o‘ta panjaralardagi tok tashuvchilarning energetik spektrini hisoblash usullari kvantlashgan o‘rachalarda zarralarning energetik spektri kabi hisoblanadi. Bunda erkin elektronning assasi kristalldagi

elektronning samaraviy massasi bilan almashtiriladi. Bu hisoblash metodi potensial to‘siqlarni hosil qiluvchi atomli qatlamlar sonining ortishi bilan hisoblash hajmi (darajasi) orta (murakkablasha) boradi.

6. O’lchamli kavantlashgan struktura(potensial o’ra, ip, nuqta)larda tanlangan yo’nalishda elektronlarning energiyasi kvantlashib qoladi va energiyasi o’lchamning kvadratiga teskari proporsional bo’ladi. Qayd etish mumkinki, o‘racha yoki to‘siqlar o‘lchamlarining ortishi bilan hisoblashning aniqlik darajasi ortib boradi. Xususan chiziqli o‘lchamlari 8-10 panjara doimiyliklaridan katta bo‘lgan o‘ralar va to‘siqlar uchun qo‘llaniladigan bu usul, amalda, juda katta aniqlik bilan natija beradi.

Adabiyotlar

1. O‘zbekiston Respublikasining birinchi Prezident Islom Karimovning O‘zbekiston Respublikasi Konstitutsiyasining 21 yilligiga bag‘ishlangan tantanali yig’ilishdagi tabrik so‘zi. Zionet. 2013.
2. Nedorezov S.S. // FTT. 1970. T.12. № 8. S.2269-2276.
3. Matulis A., Piragas K. // FTP. 1975. T.9. № 11. S.2202-2204.
4. Dg‘yakonov M.I., Xaetskiy A.V. // JETF. 1982. T.82. № 5. S.1584-1590.
5. Merkulov I.A., Perel V.I., Portnoy M.E. // JETF. 1991. T.99. № 4. S.1202-1214.
6. Bir G.L., Pikus G.E. Simmetriya i deformatsionnqe effekti v poluprovodnikax. - M.: “Nauka”, 1972. - 584s.
7. Ivchenko E.L., Rasulov R.YA. Simmetriya i realnaya zonnaya struktura poluprovodnikov. Tashkent. “Fan”. 1989. -126 s.
8. Broydo D.A., Cham L.J. // Phys. Rev. B. 1985. V.35. № 2. .888-892.

INTERNET manzillari

1. http://www.bookshunt.ru/b5808_termodinamika
2. http://www.y10k.ru/books/detail5887.html
3. http://nanophysics.ac.ru/
4. https://istina.msu.ru/collections/3518908/
5. https://scientificrussia.ru/articles/hh-mezhdunarodnyj-simpozium-nanofizika-i-nanoelektronika