

**ЎЗР ФА ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/27.02.2020.FM/T.110.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ

ДАВЛАТОВ АБРОР БОРИЖОН ЎҒЛИ

**A₃B₅ ЯРИМЎТКАЗГИЧ БИРИКМАЛИ НАНОИПЛАРДА ЭЛЕКТРОН
ГАЗИНИНГ ЭНЕРГЕТИК СПЕКТРИ ВА СТАТИСТИКАСИ**

01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси

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

Тошкент – 2022

Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)

Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)

Давлатов Аброр Борижон ўғли

A_3B_5 яримўтказгич бирикмали наноипларда электрон газининг энергетик спектри ва статистикаси..... 3

Давлатов Аброр Борижон угли

Энергетический спектр и статистика электронного газа в нанонитях полупроводниковых соединений A_3B_5 22

Davlatov Abror Borijon ogli

Energy spectrum and statistics of electronic gas in nanowires of semiconductor compounds A_3B_5 40

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ
List of published works..... 44

**ЎЗР ФА ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/27.02.2020.FM/T.110.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ

ДАВЛАТОВ АБРОР БОРИЖОН ЎҒЛИ

**A₃B₅ ЯРИМЎТКАЗГИЧ БИРИКМАЛИ НАНОИПЛАРДА ЭЛЕКТРОН
ГАЗИНИНГ ЭНЕРГЕТИК СПЕКТРИ ВА СТАТИСТИКАСИ**

01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси

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

Тошкент – 2022

**Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар
Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестатсия комиссиясида В2021.4.PhD/FM478 рақам билан
рўйхатга олинган.**

Диссертация Ўзбекистон Фанлар академияси Физика техника институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш вебсаҳифасида (<http://fti-kengash.uz/>) ва «Ziyonet» Ахборот-таълим порталида (www.ziyonet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Гулямов Гафур

физика-математика фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар:

Расулов Рустам Явқачович

физика-математика фанлари доктори, профессор

Кучкаров Қудрат Мамарасулович

физика-математика фанлари доктори, катта илмий
ходим

Етакчи ташкилот:

Тошкент давлат техника университети

Диссертация ҳимояси Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси Физика-техника институти ҳузуридаги илмий даражалар берувчи DSc.02/27.02.2020.FM/Т.110.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2022 йил «___» _____ соат _____ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100084, Тошкент ш., Чингиз Айтматов кўчаси, 2б-уй, Тел./факс: (99871) 235-42-91, e-mail: info.fti@uzsci.net, Физика-техника институти мажлислар зали).

Диссертация билан Физика-техника институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (___ рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 100084, Тошкент ш., Чингиз Айтматов кўчаси, 2б-уй. Тел./факс: (99871) 235-42-91.

Диссертация автореферати 2022 йил «___» _____ куни тарқатилди. (2022 йил «___» _____ даги _____ рақамли реестр баённомаси)

Х.К. Олимов

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

Ж.С. Ахатов

Илмий даражалар берувчи
Илмий кенгаш котиби,
т.ф.д., катта илмий ходим

Ш.Н. Усмонов

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

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Жаҳонда кичик ўлчамли квант ип, квант нуқта ва квант қатламларни тадқиқ этиш, яримўтказгичли бир ўлчовли тузилмаларни ўрганиш, бир ўлчовли яримўтказгичли конструкцияларни ишлаб чиқариш технологияси жадал ривожланиб бораётганлиги сабабли катта қизиқиш уйғотмоқда. Турли хил оптик ва электрон асбоблар учун потенциал қурилиш блоклари, нанометр ўлчамдаги лазерлар, ёруғлик диодлари, майдон-эффектли транзисторлар, фотодетекторлар ва қуёш элементлари ишлаб чиқилмоқда. Ушбу ноёб хусусиятларни наноматериалнинг ўлчамларидаги электронларнинг чекланган ҳаракати билан боғлаш ҳамда бундай асбобларнинг аниқлик билан ишлашини таъминлаш-нанотузилмалардаги ток ташувчилар табиатини аниқлашга алоҳида эътибор қаратилмоқда.

Жаҳонда наноўлчамли объектлар ва улар асосидаги асбоблар олиниши асосан лаборатория шароитида молекуляр-нурли эпитакия технологияси асосида ноёб хусусиятларга эга бўлган яримўтказгичлар юпқа қатламлари яратилмоқда. Бу йўналишда яримўтказгичли наноиплар радиусини нанометр тартибидаги гетеротузилмаларнинг энергиясини ҳисоблаш бўйича назарий моделларни яратиш ва уларнинг энергия спектрларини тадқиқ қилиш долзарб вазифаларидан ҳисобланади. Тор зонали InP/InAs/InP гетеротузилмали яримўтказгичли наноипларда ўтказувчанлик зонаси кучли нопараболик хусусиятга эга бўлиб электрон асбобларнинг ишини оптималлаштириш учун нафақат энергетик спектрлар, балки турлича яримўтказгич материаллари асосида яратилган наноипларда ток ташувчиларни статистикасини аниқлаш лозим. Экспериментал маълумотларни тушунтира оладиган математик моделларни яратиш InP/InAs/InP гетеротузилмали наноипларда кечаётган физик жараёнларни тавсифлаш, шунингдек InP/InAs/InP каби гетероструктураларда квази-бир ўлчамли электрон газини хоссаларини ўрганиш (ўтказувчанлик зонасини нопараболик хусусиятларини ҳисобга олган ҳолда чекли чуқурликдаги квант ўрали наноипда электрон спектрини характерлаш яратиш, газни термодинамик ҳолатлар зичлигини температурага боғлиқлигини, концентрация, кимёвий потенциал ва энтропиясини аниқлаш в.х.) долзарб вазифалардан ҳисобланади.

Республикамызда илм-фан ривожига, жумладан яримўтказгичли асбоблар физикаси ва электроника соҳасини ривожлантиришга алоҳида эътибор қаратилмоқда. 2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тараққиёт стратегиясида, жумладан «Иқтисодиётни электр энергияси билан узлуксиз таъминлаш ҳамда “Яшил иқтисодиёт” технологияларини барча соҳаларга фаол жорий этиш, иқтисодиётнинг энергия самарадорлигини 20 фоизга ошириш»¹. Бу борада турли ташқи таъсирларга чидамли янги электрон техника материаллари ва улар асосидаги

¹ Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2022 йил 28 январдаги ПФ-60-сон “2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тараққиёт стратегияси тўғрисида”ги Фармони.

структураларни ишлаб чиқиш ҳамда уларнинг параметрларини назорат қилишнинг самарали усулларини яратиш муҳим масалалардан ҳисобланади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2022 йил 28 январдаги ПФ-60-сон «2022-2026 йилларга мўлжалланган Янги Ўзбекистоннинг тараққиёт стратегияси тўғрисида»ги Фармони, 2019 йил 22 августдаги ПҚ-4422-сон «Иқтисодиёт тармоқлари ва ижтимоий соҳанинг энергия самарадорлигини ошириш, энергия тежовчи технологияларни жорий этиш ва қайта тикланувчи энергия манбаларини ривожлантиришнинг тезкор чора-тадбирлари тўғрисида», 2020 йил 10 июлдаги ПҚ-4779-сон «Иқтисодиётнинг энергия самарадорлигини ошириш ва мавжуд ресурсларни жалб этиш орқали иқтисодиёт тармоқларининг ёқилғи-энергетика маҳсулотларига қарамлигини камайтиришга доир кўшимча чора-тадбирлар тўғрисида»ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот иши Ўзбекистон Республикасининг фан ва технологиялар ривожланишининг Ф2. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» устувор йўналиши доирасида бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Тўғри тўртбурчакли ва цилиндрик наноипларда чексиз ва чекли чуқур потенциал ўра моделларидан фойдаланган ҳолда энергетик сатҳлар, тўлқин функциялар ҳамда электрон гази учун концентрация, термодинамик ҳолатлар зичлиги ва бир электронга тўғри келувчи энтропияларни ҳисоблашда бир қатор таниқли хорижий олимлар катта ҳисса қўшганлар, жумладан Н.В. Ткач, И.В. Пронишин, А.М. Маханец (Украина), Б.Р. Наг, С. Гангопадхйай (Хиндистон), А. Понсе (Франция), Э.П. Покатилов, В.А. Фоноберов, С.Н. Балабан (Молдова), Б.М. Фомин (Белгия). И. Кнежевич, Э. Б. Рамайя, Ю.В. Тупиков (АҚШ), А.А. Варламов, А.В. Кавокин (Италия), Ю.М. Гальперин, А.Ю. Кунцевич, В.М. Пудалов (Россия), К. Янссон, Э. Линд (Швеция).

Яримўтказгичлар физикасининг долзарб масалаларини ечишда Ўзбекистоннинг таниқли олимлари, жумладан: Р.А. Муминов, М.К. Бахадирханов, С. Зайнобиддинов, А.С. Саидов, Қ.П. Абдурахманов, Э.З. Имомов, Р.Я. Расулов, Ш. Отажоновлар томонидан яримўтказгичли квант ўра, квант нуқта ва квант ипларда энергия ҳолатлари ва термодинамик характеристикалари борасида кўплаб илмий изланишлар амалга оширилган.

Шу билан бирга, тўғри тўртбурчакли ва цилиндрик наноипларда чексиз ва чекли чуқур потенциал ўра моделларидан фойдаланиб энергетик сатҳлар ва тўлқин функцияларни ҳисоблашларда дисперсияни нопараболиклиги, эффектив массанинг потенциал тўсиқ-потенциал ўра чегарасида сакраб ўзгариши ҳисобга олинмаган ҳамда наноиплардаги электрон гази энергетик ҳолатлар зичлигини ҳарорат таъсирида ўзгаришини тушинтириш учун термодинамик ҳолатлар зичлигидан фойдаланилмаган.

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган илмий текшириш институтидаги илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация тадқиқоти ЎзР ФА Физика-техника институти илмий тадқиқот изланишлари ВА-ФА-Ф-2-005 «Si, $Cu_2ZnSn(S_{1-x}Se_x)_4$ ва кенг зонали яримўтказгичлар асосидаги янги технологик ёндашувлар билан олинган структураларда ток ташувчилар ўтиш жараёнларнинг физикавий қонуниятлари» (2017-2020 йй.) мавзусидаги лойиҳалари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади тўғри тўртбурчакли ва цилиндрик потенциал ўрали наноипларда электронлар энергиясини дисперсияси нопараболик бўлган ҳолатлар учун ўрганиш ҳамда наноипларда электронлар гази термодинамик ҳолатлар зичлиги, концентрацияси, кимёвий потенциали ва энтропиясини ўрганишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

InP/InAs/InP гетеротузилмали наноипларда чекли чуқур потенциал ўра моделида электронлар энергиясини ҳисоблаш усуллари таҳлил этиш, ҳисоблаш усулларидан фойдаланиб, содда тенгламалар келтириб чиқариш, наноипларда электронлар ва коваклар эффектив массаларини унинг чизиқли ўлчамларига боғлиқлигини аниқлаш;

тўғри тўртбурчакли ва цилиндрик потенциал ўрали наноипларда электронлар энергия сатҳларини солиштириш, улар орасидаги умумийликни чизиқли ўлчамлари орқали келтириш;

яримўтказгичли наноипларда электронлар термодинамик ҳолатлар зичлиги, концентрацияси ва энтропиясини ҳисоблаш;

наноиплардаги электронлар гази кимёвий потенциалини ҳарорат бўйича ўзгаришини ўрганиш;

Тадқиқотнинг объекти. InP/InAs/InP гетеротузилмали наноиплардаги электронлар гази.

Тадқиқотнинг предмети. Яримўтказгичли наноипдаги электронлар энергия сатҳлари, концентрацияси, термодинамик ҳолатлар зичлиги, кимёвий потенциали ва энтропияси.

Тадқиқотнинг усуллари. Тадқиқотда назарий физиканинг тақрибий усуллари; Сонли таҳлил, математик моделлаштириш, дифференциал ҳисоблар каби усуллардан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

InP/InAs/InP-гетеротузилмали наноипларда зона тузилишидаги нопараболиклигини ва потенциал ўра чуқурлиги чекли эканлигини, InP/InAs-гетероўтишда эффектив масса ўзгаришини ҳисобга олган ҳолда минизоналар спектрини ҳисоблайдиган тенгламалар топилган;

илк бор тўғри тўртбурчакли ва цилиндрик потенциал ўрали наноипларда энергия спектрлари ва тўлқин функцияси Шредингер тенгламасини ечиш орқали аниқланган;

наноипларда электронлар ва коваклар эффектив массаларининг кўндаланг ўлчамлари ортиб борганда камайиши энергия спектрлари ёрдамида аниқланган;

цилиндрик наноқатламдаги параболик ва нопараболик дисперсияли ҳолатлар энергетик спектрлари Шредингер тенгламасини ечиш оркали аниқланган;

илк бор тўла зарралар сони тенгламасидан фойдаланиб наноиплардаги электронлар концентрацияси, термодинамик ҳолатлар зичлиги, энтропиясини ифодаловчи тенгламалар топилган ва уларнинг температурага боғлиқлиги аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари. Таклиф этилган ва InP/InAs/InP гетеротузилмали наноипда синаб кўрилган бир ўлчамли электрон газини муҳим хоссалари: энергия спектри, кимёвий потенциали, концентрацияси, термодинамик ҳолатлар зичлиги ва энтропиясини ифодаловчи тенгламаларни A_3B_5 группасига таллуқли яримўтказгичлар асосидаги бошқа гетеротузилмали наноипларга ҳам қўллаш мумкин.

Тадқиқот натижаларининг ишончилиги олиб борилган назарий ҳисоблашларни бажаришда халқаро тан олинган методлардан ва услубий жиҳатдан синалган математик усуллардан фойдаланилгани, назарий ҳисобланган натижалар адабиётларда келтирилган тажриба натижаларига мос келиши билан асосланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти турли геометрик шакллардаги ва ўлчамлардаги яримўтказгичли наноипларда энергетик сатҳлар тўғрисида миқдорий маълумотлар аниқланганлигида ҳамда ушбу тизимларда электронлар статистикаси ҳақидаги янги тасаввурларни яратилганлигида ўз ифодасини топган.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти яримўтказгичли наноиплардаги электрон газининг физик хоссалари ва энергетик спектрлари асосида наноипли яримўтказгич структуралар олиш билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. A_3B_5 яримўтказгич бирикмали наноипларда электрон газининг энергетик спектри ва статистикаси бўйича олинган илмий натижалар асосида:

наноипларда электронлар энергия сатҳлари, концентрацияси ва термодинамик ҳолатлар зичлигининг харорат таъсирида ўзгариши учун олинган натижалардан «Фотон» Акциядорлик жамияти («Фотон» АЖ) да яримўтказгичли транзисторлар ишлаб чиқаришда қўлланилмоқда. («Ўзэлтехсаноат» уюшмасининг 2021 йил 22 декабрга 04-3/2717-сонли маълумотномаси). Диссертацияда олинган натижаларни технологик жараёнга қўллаш майдон транзисторларининг кириш ва чиқиш характеристикаларини назорат қилиш имконини берган;

Наманган муҳандислик-технология институтида ОТ-Ф-74-«Яримўтказгичли қоришмалар ва кучли лигерланган яримўтказгичлар энергетик спектрларини тадқиқ қилиш» фундаментал лойиҳасининг илмий-техникавий вазифаларини бажаришда, диссертацияда ишлаб чиқилган наноипларда электронлар концентрацияси ва термодинамик ҳолатлар зичлиги учун олинган ифодалардан самарали фойдаланилган (Наманган муҳандислик-технология институтининг 2022 йил 7 февралдаги 310-024-сон

маълумотномаси). Мазкур лойиҳада диссертацияда олинган натижалардан фойдаланиш яримўтказгичли қоришмалар ва кучли легирланган яримўтказгичлар энергетик спектрларини ва улардаги энергия ҳолатлар зичлигига ҳароратнинг таъсирини тушунтириш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Мазкур тадқиқот иши натижалари 10 та халқаро ва 4 та республика миқёсидаги илмий–амалий анжуманларида муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Диссертация мавзуси бўйича жами 21 та илмий иш чоп этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 7 та мақола, жумладан 4 та хорижий ва 3 та республика журналларида чоп этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, илова ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 70 та расм ва 5 та жадвални ўз ичига олган ҳолда 100 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

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

Диссертациянинг **«Яримўтказгичли наноипларнинг ўстириш ва улардаги энергетик ҳолатларни ҳисоблаш усуллари»** деб номланган биринчи бобида яримўтказгичли наноипларнинг ўстириш усуллари ва уларнинг яримўтказгичли асбоблар ишлаб чиқаришда ишлатилиши ҳақида маълумотлар берилган. Ҳозирги кунгача жаҳонда яримўтказгичли наноиплардаги энергия сатҳлари, концентрация, термодинамик ҳолатлар зичлиги, энтропия ва кимёвий потенциалларни ҳисоблаган ишларни таҳлил қилинган. Ҳали етарлича ёритилмаган ва ўрганилиши зарур бўлган муҳим масалалар яққол ажратилиб, булар асосида муаммонинг қўйилиши шакллантирилган.

Диссертациянинг **«Яримўтказгичли, тўғри тўртбурчакли наноипларда энергия сатҳлари ва тўлқин функциялари»** деб номланган иккинчи бобида яримўтказгичли тўғри тўртбурчакли чексиз ва чекли чуқур потенциал ўрали наноипларда электронлар ва коваклар энергия сатҳлари ҳамда тўлқин функциялари дисперсиянинг нопараболиклигини ҳисобга олган ҳолда аниқланган.

Тўғри тўртбурчакли чекли чуқур потенциал ўрали наноипдаги зарралар тўлқин функцияси ва энергиясини аниқлашда барьер ичида ва ўра ичида зарра массаси ўзгаришини ҳисобга олган ҳолда, керакли чегаравий шартларни қўйиб, Шредингер тенгламасини ечганимизда куйидаги натижаларга келамиз.

$$E_y = \frac{\hbar^2}{2m_y L_y^2} \left(\pi n_y - 2 \text{Arcsin} \sqrt{\frac{\gamma E_y}{(\gamma - 1)E_y + V_0}} \right)^2, E_z = \frac{\hbar^2}{2m_z L_z^2} \left(\pi n_z - 2 \text{Arcsin} \sqrt{\frac{\gamma E_z}{(\gamma - 1)E_z + V_0}} \right)^2. \quad (1)$$

Бунда

$$\gamma = \frac{m_b}{m_y}, E(n_y, n_z, k_x) = E_y + E_z + E_{k_x} = E_y + E_z + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad (2)$$

Шредингер тенгламасини чекли орттирмалар усули ёрдамида ечганимизда куйидаги тенгламалар келиб чиқади.

$$\frac{\psi(y + \delta y)}{m^*(y + \delta y/2)} = \left[\frac{2(\delta y)^2}{\hbar^2} (V(y) - E_y) + \frac{1}{m^*(y + \delta y/2)} + \frac{1}{m^*(y - \delta y/2)} \right] \psi(y) - \frac{\psi(y - \delta y)}{m^*(y - \delta y/2)} \quad (3)$$

$$\frac{\psi(z + \delta z)}{m^*(z + \delta z/2)} = \left[\frac{2(\delta z)^2}{\hbar^2} (V(z) - E_z) + \frac{1}{m^*(z + \delta z/2)} + \frac{1}{m^*(z - \delta z/2)} \right] \psi(z) - \frac{\psi(z - \delta z)}{m^*(z - \delta z/2)} \quad (4)$$

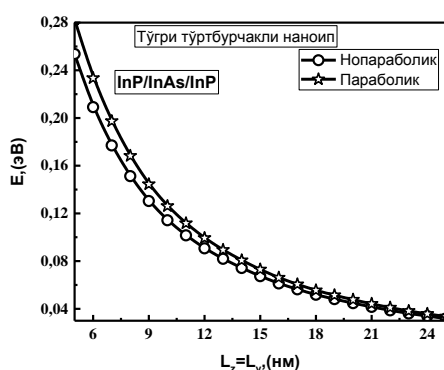
Зонанинг нопараболиклигини ҳисобга олишда эффектив массаларни куйидагича оламиз.

$$m_{InPi}(E) = m_{0InPi} (1 + \alpha_{InPi}(E - V)), \quad \alpha_{InPi} = \frac{1}{E_{gInP}} \left(1 - \frac{m_i}{m_0}\right)^2, \quad \alpha_{InAsi} = \frac{1}{E_{gInAs}} \left(1 - \frac{m_i}{m_0}\right)^2 \quad (5)$$

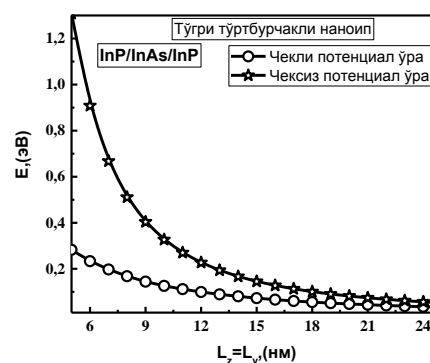
Бу ерда V - потенциал тўсиқ баландлиги, α - нопараболиклик коэффициенти, m_i - электронни эффектив массаси, m_0 - электроннинг ўтказувчанлик зонаси тубидаги эффектив массаси, E_g - наъмунани тақиқланган зонаси кенглиги. Олинган натижаларни таҳлил қилиш учун InP/InAs/InP гетероструктурали наноипни танлаб оламиз. InAs ва InP яримўтказгич наъмуналар учун зонавий параметрлар 1-жадвалда келтирилган.

1-жадвал. InAs ва InP яримўтказгич наъмуналар учун зонавий параметрлар

Параметрлар	E_g (eV)	$\frac{m_e}{m_0}$	$\frac{m_{hh}}{m_0}$	$\frac{m_{lh}}{m_0}$	χ (eV)	α_e $\left(\frac{1}{eV}\right)$	α_{hh} $\left(\frac{1}{eV}\right)$	α_{lh} $\left(\frac{1}{eV}\right)$	Δ_0 (eV)	ΔE_C (eV)	ΔE_V (eV)
InAs	0.36	0.023	0.41	0.026	4.91	2.65	0.97	2.63	0.38	0.52	0.47
InP	1.35	0.077	0.65	0.096	4.39	0.63	0.09	0.6	0.11		



1-Расм. Чекли чуқур потенциал ўрали тўғри тўртбурчакли наноипда электрон энергиясини ўра ўлчамига боғлиқлиги



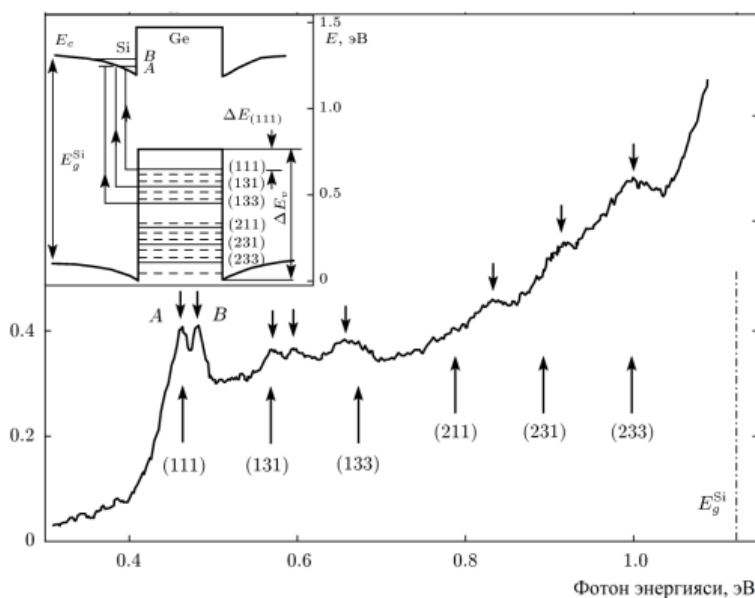
2-Расм. Чексиз ва чекли чуқур потенциал ўрали тўғри тўртбурчакли наноипда электрон энергиясини ўра ўлчамига боғлиқлиги

1-расмда чекли чуқурликдаги потенциал ўрали тўғри тўртбурчакли наноипларда параболик ва нопараболик дисперсияли электронлар энергияларини наноип ўлчамларига боғлиқлиги тасвирланган. 2-расмда чекли ва чексиз чуқурликдаги потенциал ўрали тўғри тўртбурчакли наноипларда нопараболик дисперсияли электронлар энергияларини наноип ўлчамларига боғлиқлиги тасвирланган. Ҳисоблашларни бажаришда электронлар эффектив массаларини наноип ичида $0,023m_0$ ва ташқарисида $0,077m_0$ деб олдик. Потенциал ўра чуқурлиги эса, $\Delta E_C = \chi_{InAs} - \chi_{InP} = 0,52$ (эВ) га тенг бўлади. Ҳисоблашларни тўғри тўртбурчакли наноипнинг асоси квадрат кўринишидаги, ўчами 5 дан 25 нм гача бўлган ҳоллар учун бажардик. Тўғри тўртбурчакли наноипнинг ўчами 15 нм бўганда чексиз чуқур потенциал ўра модели $0,14533$ эВ, чекли потенциал ўра модели эса $0,07292$ эВ натижа берар экан. Агар чексиз чуқур потенциал ўра ўрнига чекли чуқур потенциал ўра моделини танласак, сатҳлари пастроқда бўлар экан. Тўғри тўртбурчакли

наноипнинг ўчами 15 нм бўганда параболик дисперсияли ҳолат учун 0,07292 эВ, нопараболик дисперсияли ҳолат учун эса 0,06738 эВ энергия тўғри келади. Демак, дисперсияни нопараболиклигини ҳисобга олсак, энергия сатҳлари пастроқда бўлар экан. Умумий олганда наноип кўндаланг ўлчами ортиб борса энергия сатҳлари пасайиб борар экан. Тўғри тўртбурчакли наноипнинг қирралари ўлчамлари бир-бирига яқин бўлганда, уни квант нуқтаси дейиш мумкин. ²Ишда Ge/Si-квант нуқтаси учун ён томонлама фотоўтказувчанлик спектрлари ёрдамида олинган тажриба натижалари билан (3-расм) биз келтирган (1) тенглама берадиган натижаларни солиштирамиз (2-жадвал). Тажрибада коваклар энергия сатҳлари ва электрон ҳолатлар орасида оптик ўтишлар кузатилган. Ёруғликнинг квант энергияси ва коваклар энергия сатҳлари қуйидаги муносабат билан боғланган.

$$h\nu_{n_x n_y n_z} = E_{g, Si} - V_0 + E_{n_x n_y n_z}, \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Бу ерда, $E_{g, Si}$ -кремнийнинг тақиқланган зонаси кенглиги (1,12 эВ), V_0 -ўрани чуқурлиги (0,84 эВ), $E_{n_x n_y n_z}$ -коваклар энергия сатҳлари. Чекли потенциал ўра модели бўйича келтирган транцендент тенгламамиз берадиган натижалар тажриба натижаларига анча яқин келади.



3-расм. Ge/Si гетеротузилма квант нуқтаси учун [2] ишда олинган тажриба натижалари.

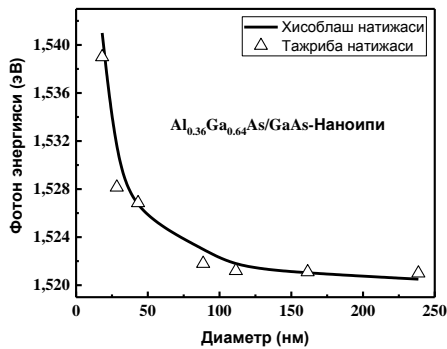
2-жадвал.Тажрибада олинган ва бизнинг ҳисоблаш натижаларимиз.

Ютилган фотон энергияси	Тажриба натижалари(эВ)	Ҳисоблаш натижалари (эВ)
$h\nu_{(1,1,1)}$	0.461	0.465
$h\nu_{(1,3,1)}$	0.571	0.563
$h\nu_{(1,3,3)}$	0.657	0.661
$h\nu_{(2,1,1)}$	0.833	0.819
$h\nu_{(2,3,1)}$	0.914	0.917
$h\nu_{(2,3,3)}$	1.000	1.015

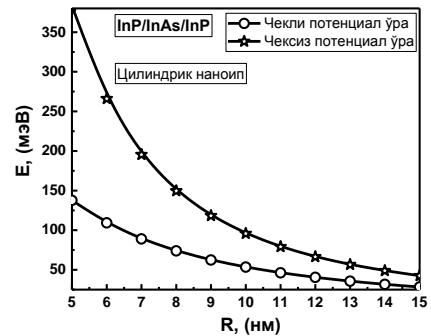
Диссертациянинг «Яримўтказгичли цилиндрик наноипларда электрон энергия сатҳлари ва тўлқин функциялари» деб номланган

² Talochkin, A. B., Chistokhin, I. B., & Markov, V. A. Nanotechnology, 20(17), 175401.2009.

учинчи бобида яримўтказгичли цилинрик чексиз ва чекли чуқур потенциал ўрали наноипларда электронлар ва коваклар энергия сатхлари ҳамда тўлқин функциялари дисперсиянинг нопараболиклигини ҳисобга олган ҳолда аниқланган.



4-расм. $\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{As}/\text{GaAs}$ гетеротузилмали наноипларда энергиянинг наноип диаметрига боғлиқлиги.



5-расм. Чексиз ва чекли чуқур потенциал ўрали цилинрик наноипда электрон энергиясини унинг радиусига боғлиқлиги

Цилинрик чекли чуқур потенциал ўрали наноипдаги зарралар тўлқин функцияси ва энергиясини аниқлашда барьер ичида ва ўра ичида зарра эффектив массаси ўзгаришини ҳисобга олган ҳолда, керакли чегаравий шартларни қўйиб, Шредингер тенгламасини ечганимизда қуйидаги транцендент тенгламага келамиз.

$$\frac{J_l'(k_y R) K_l(\gamma_b R)}{J_l(k_y R) K_l'(\gamma_b R)} = \frac{\gamma_b m_y}{k_y m_b} \quad (6)$$

Бунда

$$k_y = \sqrt{\frac{2m_y}{\hbar^2} E}, \quad \gamma_b = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Агар $k_A R$ ва $\gamma_B R$ ифодалар нолга интилганда $l=0$ ҳолат учун мавҳум аргументли $I_l(\zeta)$ Бессел функцияси ва $K_l(\zeta)$ Макдональд функцияларни аргументи бўйича қаторга ёйиб биринчи ҳадлари билан чегаралансак, у ҳолда хатолик камроқ бўлади. (6) тенгламадан электрон энергияси учун қуйидаги ифода келиб чиқади

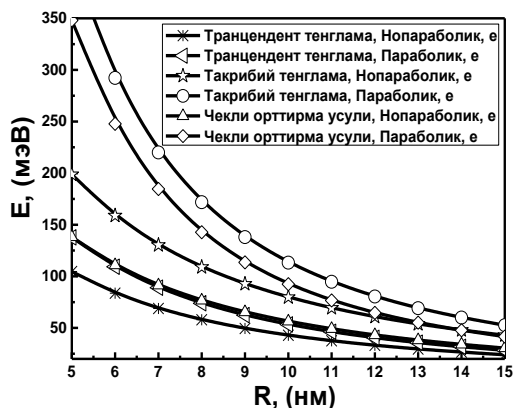
$$E_{0,1} = \frac{4\hbar^2}{m_A R^2} \frac{\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R K_0(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R) + 2K_1(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R)}{\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R K_0(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R) + 4K_1(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R)}. \quad (7)$$

Бу ерда V_0 - потенциал тўсиқ баландлиги, R -наноип радиуси, m_A, m_B - электронни потенциал ўра ичидаги ва тўсиқдаги эффектив массалари.

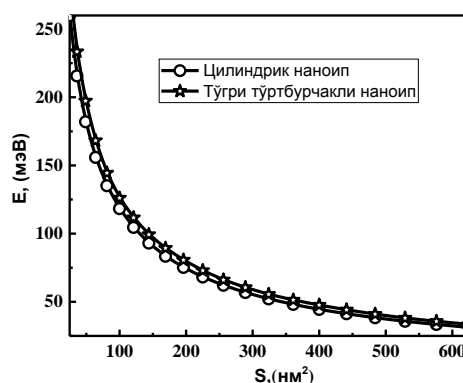
$\text{GaAs}/\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{As}$ гетероструктурали наноиплар учун ³ишда олинган тажриба натижалари билан бизнинг ҳисоблаш натижаларимизни солиштириш учун 4-расмдаги график олинди. Графикка эътибор берсак, бизнинг ҳисоблаш натижаларимиз асосида тажриба натижаларини таҳлил қилишимиз мумкин эканлиги равшан. Цилинрик наноип учун Шредингер тенгламасини чекли орттирмалар усули ёрдамида ечганимизда қуйидаги ифода келиб чиқади.

³ Dimberger, F., Kammermeier, M., König, J., Forsch, M., Faria Junior. Applied Physics Letters, 114(20), 202101. (2019).

$$\psi(\rho + \delta\rho) = \frac{8 \left\{ \frac{(\delta\rho m(x))^2}{\hbar^2} [V(\rho) - E] + m(\rho) \right\}}{\left\{ 2m(\rho) \left(2 + \frac{\delta\rho}{\rho} \right) - m(\rho + \delta\rho) + m(\rho - \delta\rho) \right\}} \psi(\rho) - \frac{\left\{ 2m(\rho) \left(2 - \frac{\delta\rho}{\rho} \right) + m(\rho + \delta\rho) - m(\rho - \delta\rho) \right\}}{\left\{ 2m(\rho) \left(2 + \frac{\delta\rho}{\rho} \right) - m(\rho + \delta\rho) + m(\rho - \delta\rho) \right\}} \psi(\rho - \delta\rho) \quad (8)$$

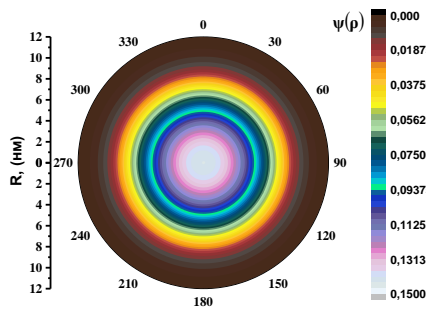


6-Расм. Чекли чукур потенциал ўрали цилиндрик наноипда параболик ва нопараболик дисперсияли электронлар энергиясини унинг радиусига боғлиқлиги

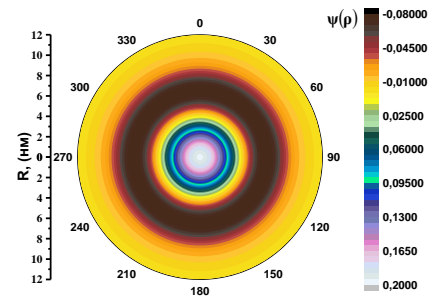


7-расм. Цилиндрик ва тўғри тўртбурчакли чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг биринчи сатҳ энергияларини кесим юзаларига боғлиқлиги.

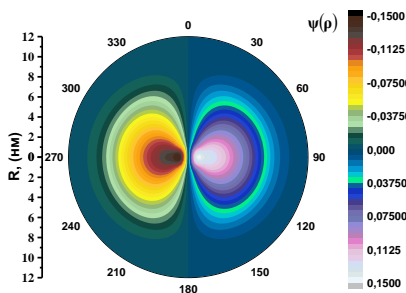
Юқорида келтирилган тенгламалардан фойдаланиб, зона нопараболиклиги учун (5) тенгламани қўллаб InP/InAs/InP гетероструктурали наноип учун 5-6-расмларда тасвирланган графикларни оламиз. Ҳисоблашларни бажаришда электронлар эффектив массаларини наноип ичида $0,023m_0$ ва ташқарисида $0,077m_0$ деб олдик. Потенциал ўра чуқурлиги эса, $\Delta E_C = \chi_{InAs} - \chi_{InP} = 0,52$ (эВ) га тенг бўлади. Ҳисоблашларни цилиндрик наноипнинг радиусини 5 дан 15 нм гача бўлган ҳоллар учун бажардик. Цилиндрик наноипнинг радиуси 10 нм бўлганда чексиз чукур потенциал ўра модели 95,79 мэВ, чекли потенциал ўра модели эса 53,39 мэВ натижа беради. Агар чексиз чукур потенциал ўра ўрнига чекли чукур потенциал ўра моделини танласак, сатҳлар пастроқда бўлар экан. Цилиндрик наноипнинг радиуси 10 нм бўлганда нопараболик дисперсияли ҳолат учун (6) тенглама 53,397 мэВ, (7) тенглама 59,397 мэВ ва (8) тенглама 56,337 мэВ қийматлар беради. 5-расмдан кўринадик, кичик радиусларда чексиз ва чекли потенциал ўрали наноиплар энергия сатҳларида фарқ жуда катта бўлади, катта радиусларда эса сатҳлар бир-бирига яқин бўлади. 6-расмда юқорида келтирилган (6), (7) ва (8) тенгламалардан олинган натижалар солиштирилган, бизнинг келтириб чиқарган (7) ифодамиз аниқ натижаларга яқин натижалар беришини кўришимиз мумкин. InP/InAs/InP гетероструктурали тўғри тўртбурчакли ва цилиндрик наноипларда кўндаланг қирқим юзалар тенг бўлганда энергия сатҳлари деярли тенг бўлишини 7-расмдан кўришимиз мумкин. 8-13-расмларда InP/InAs/InP гетероструктурали цилиндрик наноипда ҳар-бир сатҳларга тўғри келувчи тўлқин функцияларини 2D графиги тасвирланган.



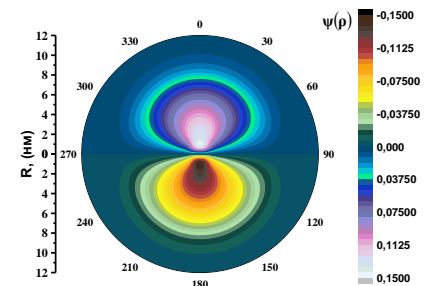
8-расм. Цилиндрик чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг (0,0) ҳолат учун тўлқин функциясининг ўра ўлчамига боғлиқлиги.



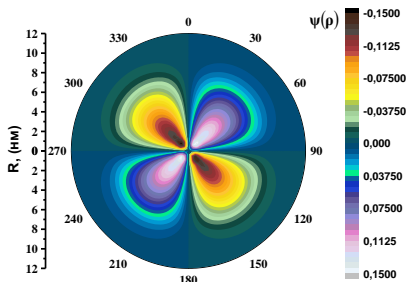
9-расм. Цилиндрик чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг (0,1) ҳолат учун тўлқин функциясининг ўра ўлчамига боғлиқлиги.



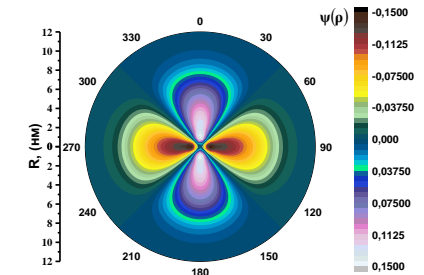
10-расм. Цилиндрик чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг (+1,0) ҳолат учун тўлқин функциясининг ўра ўлчамига боғлиқлиги.



11-расм. Цилиндрик чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг (-1,0) ҳолат учун тўлқин функциясининг ўра ўлчамига боғлиқлиги.



12-расм. Цилиндрик чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг (+2,0) ҳолат учун тўлқин функциясининг ўра ўлчамига боғлиқлиги.



13-расм. Цилиндрик чекли потенциал ўрали наноипда электроннинг (-2,0) ҳолат учун тўлқин функциясининг ўра ўлчамига боғлиқлиги.

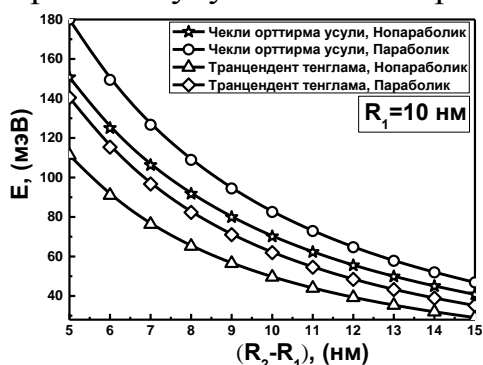
Яримўтказгичли, цилиндрик наноқатламда энергия сатҳлари ва тўлқин функциялари. Цилиндрик чекли чуқур потенциал ўрали наноқатламдаги зарралар тўлқин функцияси ва энергиясини аниқлашда барьер ичида ва ўра ичида зарра массаси ўзгаришини ҳисобга олган ҳолда, керакли чегаравий шартларни қўйиб, Шредингер тенгламасини ечганимизда кўйидаги трансцендент тенгламага келамиз.

$$\frac{\frac{m_A}{m_B} J_1(k_A R_1) I_1'(\gamma_B R_1) - J_1'(k_A R_1) I_1(\gamma_B R_1)}{\frac{m_A}{m_B} J_1(k_A R_2) K_1'(\gamma_B R_2) - J_1'(k_A R_2) K_1(\gamma_B R_2)} = \frac{N_1'(k_A R_1) I_1(\gamma_B R_1) - \frac{m_A}{m_B} N_1(k_A R_1) I_1'(\gamma_B R_1)}{N_1'(k_A R_2) K_1(\gamma_B R_2) - \frac{m_A}{m_B} N_1(k_A R_2) K_1'(\gamma_B R_2)} \quad (9)$$

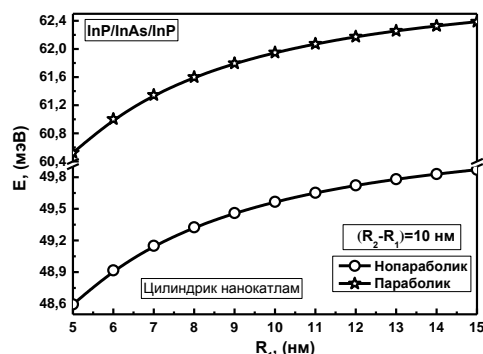
(9) трансцендент тенглама ёрдамида чекли потенциал ўрали цилиндрик наноқатламдаги электрон ва коваклар энергияларини ҳисоблаш мумкин. Чекли чуқур потенциал ўрали цилиндрик наноқатламда параболик ва нопараболик дисперсияли электронлар энергиясини қатлам қалинлигига боғлиқлиги 14-расмда келтирилган. Наноқатламда ҳам нопараболик

ҳолатларда сатхлар параболик ҳолатларниқига нисбатан пастроқда жойлашар экан. 15-расмда чекли чуқур потенциал ўрали цилиндрик наноқатламда параболик ва нопараболик дисперсияли электронлар энергиясини қатлам ички радиусига боғлиқлиги тасвирланган. Графикдан кўринадики, қатлам қалинлиги ўзгармасдан цилиндриқнинг ички радиусининг ўзгариши энергия сатхларига жуда кам таъсир этар экан.

Диссертациянинг «Яримўтказгичли наноишларда электронлар статистикаси» деб номланган тўртинчи бобида яримўтказгичли наноишларда электронлар концентрацияси, термодинамик ҳолатлар зичлиги ва энтропияси учун тенгламалар топилган.



14-расм. Чекли чуқур потенциал ўрали цилиндрик наноқатламда параболик ва нопараболик дисперсияли электронлар энергиясининг қатлам радиусига боғлиқлиги



15-расм. Чекли чуқур потенциал ўрали цилиндрик наноқатламда параболик ва нопараболик дисперсияли электронлар энергиясининг қатлам ички радиусига боғлиқлиги.

Яримўтказгичли наноишларда электронлар концентрацияси.

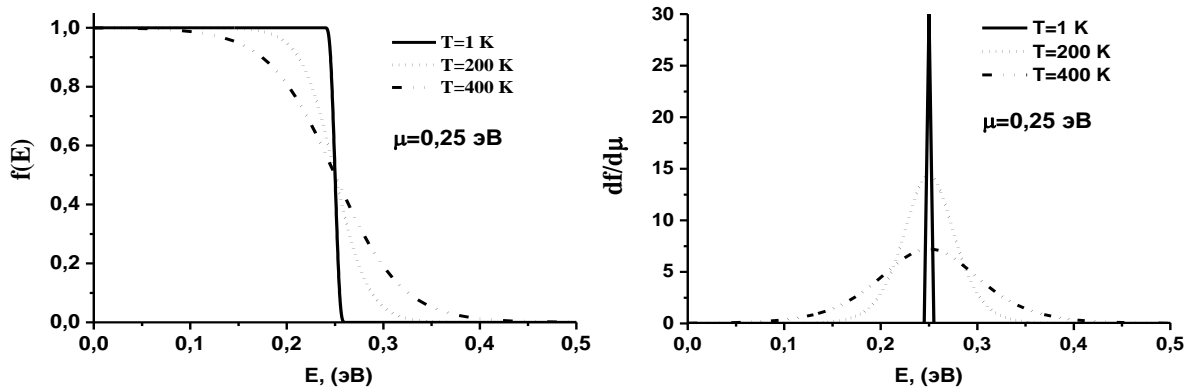
Яримўтказгичли наноишларда зарядли зарралар концентрациясини ифодалаш учун тўла зарралар сонини топиш тенгламасидан фойдаланганимизда куйидаги ифода келиб чиқади.

$$n_L = n_0 \sum_{n,l} \int_{E_{n,l}}^{\infty} \left(e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1 \right)^{-1} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{n,l}}} \quad (10)$$

Бу ерда $n_0 = \sqrt{2m/\pi^2 \hbar^2}$ - белгилаш киритиб олдик, m - электрон эффектив массаси, \hbar - Планк доимийси.

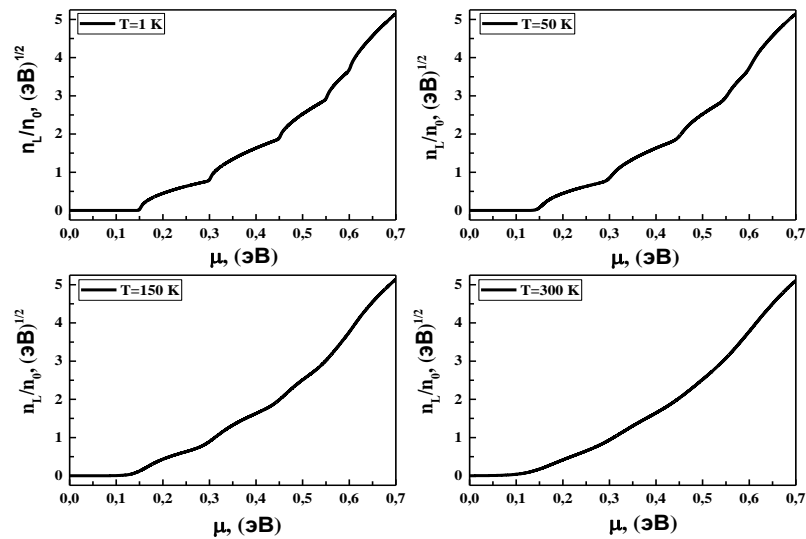
Бизга маълумки, Ферми-Дирак тақсимот функцияси $T \rightarrow 0$ бўлган ҳолда $\mu > E$ бўлганда 1 га ва $\mu < E$ бўлганда 0 га тенг бўлади. Бунда $\mu > E$ бўлган ҳолатлар электронлар билан тўлган ва $\mu < E$ бўлган ҳолатлар бўш эканлигини англатади. Ҳароратни кўтариб борганимизда, Ферми-Дирак тақсимот функциясини 1 дан нолга кескин сакраши эгила бошлайди. Ҳарорат қанча юқори бўлса, бу эгилиш бир неча kT ларда кечади. Бунда электронлар банд соҳадан бўш соҳага ёйила бошлайди. Наноишларда паст ҳароратларда энергия сатхларида энергия ҳолатлар зичлиги жуда катта бўлади, юқори ҳароратларда эса сатхлар ёйилиши ҳисобига энергия ҳолатлар зичлиги камаяди. Шунинг учун юқори ҳароратларда пиклар йўқолиб боради (16-расм). (10) ифодадаги интегрални аниқ аналитик ҳисоблашни имкони йўқ, шунинг учун куйидагича тақрибий ҳисоблаймиз. Бунда интеграл Ферми интеграл функциясининг $j = -1/2$ ҳолатдагисидир. Ихтиёрий ҳароратда интегрални ҳисоблаш учун Ферми интеграл функциясининг $j = 1/2$

ҳолатдагисини турли-хил ечимларидан фойдаланганмиз. Бунда концентрация учун қуйидаги ифодалар келиб чиқади.



16-расм. Ферми-Дирак тақсимот функцияси ва унинг ҳосиласи.

$$n_L \approx \begin{cases} n_0 \sqrt{kT} \sum_{n,l} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}}, & -191 > \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \\ 16n_0 \sqrt{\pi kT} \sum_{n,l} \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-2} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}}, & -191 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} < 1,33 \\ n_0 \sqrt{kT} \sum_{n,l} \sqrt{\left(\frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \right)^{-3} \left(2 \left(\frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \right)^2 - \frac{\pi^2}{12} \right)}, & 1,33 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \end{cases} \quad (11)$$



17-расм. Турли ҳароратларда наноипдаги электронлар концентрациясининг кимёвий потенциалга боғлиқлиги.

Ҳосил қилинган (11) тенгламадан фойдаланиб яримўтказгичли наноипдаги электронлар гази концентрациясини аниқлаш мумкин. Бунда ўлчамлари 18 ва 12,8 нм бўлган, InP/InAs/InP гетеротузилмали, тўғри тўртбурчакли наноипларда чексиз чуқур потенциал ўра моделида электронлар концентрациясини ҳисоблаймиз ($E_{(1,1)}=0,15$ эВ, $E_{(2,1)}=0,3$ эВ, $E_{(1,2)}=0,45$ эВ, $E_{(3,1)}=0,55$ эВ, $E_{(1,3)}=0,6$ эВ). 17-расмда наноипдаги электронлар гази концентрациясини кимёвий потенциалга боғлиқлиги тасвирланган. Ҳар-бир энергия сатҳидан ўтишда чизикларда синиш кузатилмоқда, бу бир минизона тўлиб иккинчи минизона бошланишини билдиради. Графиклардан кўринадики ҳарорат ортганда чизиклардаги сатҳлардан ўтиш нуқталаридаги

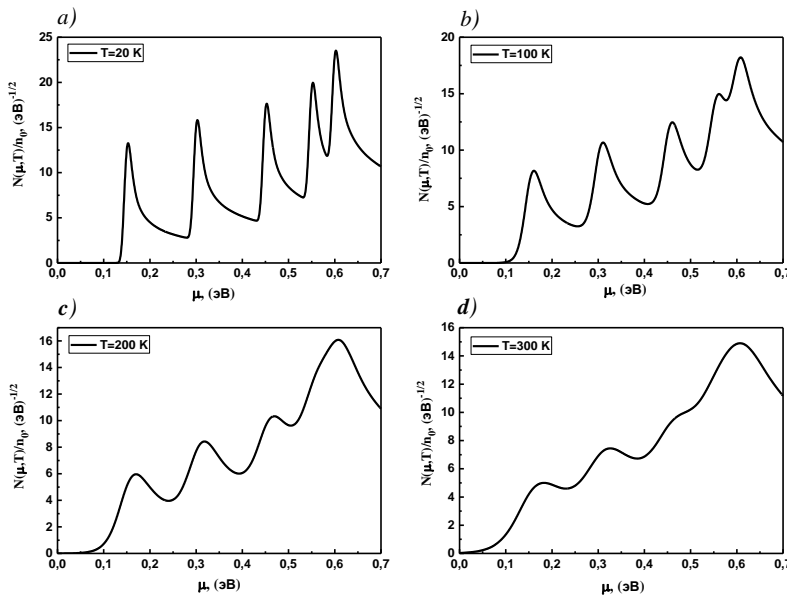
синишлар силлиқлашиб боради. Бунга сабаб ҳарорат ортганда кимёвий потенциал камайиб боришини келтиришимиз мумкин.

Яримўтказгичли наноипларда электронлар термодинамик ҳолатлар зичлиги. Яримўтказгичли наноипларда электронлар энергетик ҳолатларини ҳарорат бўйича ўзгаришини ўрганиш учун термодинамик ҳолатлар зичлигидан фойдаланамиз. (10) тенгламадан фойдаланиб термодинамик ҳолатлар зичлигини ифодалаймиз.

$$N(\mu, T) = \frac{\partial n_L}{\partial \mu} = \frac{n_0}{4kT} \sum_{n,l} \int_{E_{n,l}}^{\infty} \cosh\left(\frac{E - \mu}{2kT}\right)^{-2} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{n,l}}}. \quad (12)$$

(12) ифодадаги интегрални аниқ аналитик ҳисоблашни имкони йўқ, шунинг учун юқорида келтирилган (11) тенгламадан фойдаланиб қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз.

$$N(\mu, T) \approx \begin{cases} \frac{n_0}{\sqrt{kT}} \sum_{n,l} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}}, & -191 > \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \\ 16n_0 \sqrt{\frac{\pi}{kT}} \sum_{n,l} \left[\left(e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} - 4 \right) \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-3} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right], & -191 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} < 1,33 \\ \frac{n_0}{8} \sum_{n,l} \frac{(\pi kT)^2 + 8E_{n,l}^2 - 16\mu E_{n,l} + 8\mu^2}{(\mu - E_{n,l})^{5/2}}, & 1,33 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \end{cases} \quad (13)$$



18-расм. Турли ҳароратларда наноипдаги электронлар термодинамик ҳолатлар зичлигининг кимёвий потенциалга боғлиқлиги.

18-расмда яримўтказгичли наноипдаги электронлар гази термодинамик ҳолатлари зичлигини кимёвий потенциалга боғлиқлиги (13) тенглама асосида 20, 100, 200 ва 300 К ҳароратлар учун келтирилган. Бунда ўлчамлари 18 ва 12,8 нм бўлган, InP/InAs/InP гетеротузилмали, тўғри тўртбурчакли наноипларда чексиз чуқур потенциал ўра моделида электронлар термодинамик ҳолатлар зичлигини ($E_{(1,1)}=0,15$ эВ, $E_{(2,1)}=0,3$ эВ, $E_{(1,2)}=0,45$ эВ, $E_{(3,1)}=0,55$ эВ, $E_{(1,3)}=0,6$ эВ). Ҳар-бир энергия сатҳидан ўтишда чизиқларда синиш кузатилмоқда, бу бир минизона тўлиб иккинчи минизона бошланишини билдиради. Паст ҳароратларда чўққилар яққол кўринмоқда.

Ҳарорат кўтарилган сари энергия сатҳлари ўзгариб, чўққилар йўқолиб бормоқда. Чўққиларни йўқолиб бориши ҳароратга ва ихтиёрий иккита кўшни сатҳ оралиқ энергиясига ҳам боғлиқ экан. Чунки 4 ва 5 сатҳ ораси қолган сатҳлар орасига нисбатан кичик, 4 сатҳ деярли 200 К ҳароратда йўқолиб кетмоқда. Ҳисоблашларимизни кўрсатишича $\Delta E_{i,j} \rightarrow \Delta T$ бўлганда чўққилар йўқолиб кетади. Бу ҳолни ҳарорат кўтарилганда кимёвий потенциал аввал ортиб кейин камайиши, юқори ҳароратларда деярли чизикли камайиши билан тушунтириш мумкин.

Яримўтказгичли наноипларда электронлар энтропияси. Яримўтказгичли наноипларда битта электронга тўғри келувчи энтропияни ифодалаш учун қуйидаги тенгламадан фойдаланамиз⁴.

$$s = \left(\frac{\partial S}{\partial n_L} \right)_T = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{n_L} = \left(\frac{\partial n_L}{\partial T} \right)_\mu \left(\frac{\partial n_L}{\partial \mu} \right)_T^{-1}. \quad (14)$$

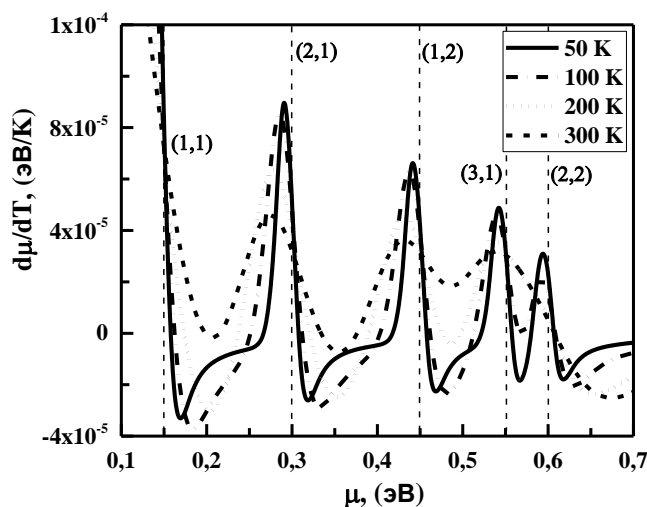
Наноиплардаги битта электронга тўғри келувчи энтропияни аналитик ҳисоблаш учун (11) тенгламадан фойдаланамиз. Бундан қуйидаги тенгламалар келиб чиқади.

$$s \approx \begin{cases} \sum_{n,l} \left[\left(\frac{k}{2} - \frac{\mu - E_{n,l}}{T} \right) e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right] \left(\sum_{n,l} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-1}, & -191 > \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \\ \frac{\sum_{n,l} \left[\left[\left(\frac{k}{2} + \frac{\mu - E_{n,l}}{T} \right) e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} + 4 \left(\frac{k}{2} - \frac{\mu - E_{n,l}}{T} \right) e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right] \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-3} \right]}{\sum_{n,l} \left[\left(e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \left(4 - e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right) \right) \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-3} \right]}, & -191 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} < 1,33 \\ \frac{4k\pi^2}{3} \sum_{n,l} \left(\frac{kT}{E_{n,l} - \mu} \right)^{3/2} \sum_{n,l} \left[\left(\frac{kT}{E_{n,l} - \mu} \right)^{5/2} \left(\pi^2 + 8 \left(\frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \right)^2 \right) \right]^{-1}, & 1,33 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \end{cases} \quad (15)$$

Яримўтказгичли наноипларда битта электронга тўғри келувчи энтропияни (14) тенглама асосида ифодаланади. Юқорида келтирилган (11) тенгламадан фойдаланиб (15) тенгламани тақрибий ифодаладик. (15) тенглама яримўтказгичли наноиплардаги битта электронга тўғри келувчи энтропияни тақрибий ифодалайди. 19-расмларда наноипдаги битта электронга тўғри келувчи энтропияни кимёвий потенциалга боғлиқлиги келтририлган. Бунда ўлчамлари 18 ва 12,8 нм бўлган, InP/InAs/InP гетеротузилмали, тўғри тўртбурчакли наноипларда чексиз чуқур потенциал ўра моделида битта электронга тўғри келувчи энтропияни ҳисоблаймиз ($E_{(1,1)}=0,15$ эВ, $E_{(2,1)}=0,3$ эВ, $E_{(1,2)}=0,45$ эВ, $E_{(3,1)}=0,55$ эВ, $E_{(1,3)}=0,6$ эВ). Графикдан ихтиёрий сатҳдаги битта электронга тўғри келувчи энтропия ҳароратга боғлиқ эмас эканли кўринмоқда. $\mu = E_{n,l}$ бўлганда битта электронга тўғри келувчи энтропия (15) тенгламадан $s \approx 5k/6$ га тенг бўлар экан. Графиклардан кўринадики ҳарорат ортганда графиклардаги тебранишлар

⁴ A.A. Varlamov, A.V. Kavokin, Y.M. Galperin. Quantization of entropy in a quasi-two-dimensional electron gas. Physical Review B, 93(15). (2016)

пиклари йўқолиб, силлиқлашиб борар экан. Бунга сабаб наноипларда ҳарорат юқори бўлганда кимёвий потенциал чизикли ўзгариб боришидир.



19-расм. Турли ҳароратларда наноипдаги битта электронга тўғри келувчи энтропиянинг кимёвий потенциалга боғлиқлиги.

Хулоса

Диссертация ишида яримўтказгичли наноипларда ҳамда цилиндрик наноқатламларда электронлар энергияси, тўлқин функцияси, концентрацияси, термодинамик ҳолатлар зичлиги ва энтропияси ўрганилди.

Тадқиқот ишининг асосий натижалари сифатида қуйидагиларни кўрсатиб ўтиш мумкин.

1. InP/InAs/InP гетеротузилмали турли шаклдаги наноипларда дисперсияси нопараболик бўлган ҳолатлар учун, InP/InAs ўтишда эффектив масса ўзгаришини ҳисобга олган ҳолда энергия сатҳлари ва тўлқин функциялари икки-хил усулда чекли потенциал ўра моделида ҳисобланган.

2. Наноипларда дисперсия нопараболик бўлганда, параболик бўлган ҳолатга нисбатан энергия сатҳлари пастрокда бўлиши аниқланган.

3. Цилиндрик чекли чуқур потенциал ўрали наноипда биринчи сатҳ энергиясини аниқловчи тенглама келтириб чиқарилган.

4. Электронлар ва коваклар эффектив массасини наноиплар ўлчамларига боғлиқ равишда ўзгариши кўрсатилган.

5. Тўғри тўртбурчак ва цилиндрик потенциал ўрали наноипларда ҳар-бир сатҳда электронлар жойлашувини 2D графиклардан фойдаланиб тушунтирилган.

6. Тўғри тўртбурчак ва цилиндрик потенциал ўрали наноипларни қирқим юзалари тенг қилиб олинганда энергия сатҳлари бир-бирига жуда яқин чиқиши аниқланган.

7. Цилиндрик қатлам қалинлиги ўзгармасдан цилиндр ички радиусининг ўзгариши энергия сатҳларига жуда кам таъсир кўрсатиши аниқланган.

8. Яримўтказгичли наноипларда концентрация, термодинамик ҳолатлар зичлиги ва энтропиясини аниқлайдиган ифода келтириб чиқарилган ҳамда уларнинг ҳарорат таъсирида ўзгариши таҳлил қилинган.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.02/27.02.2020.FM/T.110.01
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЁНЫХ СТЕПЕНЕЙ
ПРИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ АН РУз**

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ДАВЛАТОВ АБРОР БОРИЖОН УГЛИ

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОННОГО
ГАЗА В НАНОНИТЯХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
СОЕДИНЕНИЙ A_3B_5 .**

01.04.10 – Физика полупроводников

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

Ташкент–2022

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за B2021.4.PhD/FM478.

Диссертация выполнена в Физико-техническом институте Академии наук Узбекистана

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещён на веб-странице Научного совета (www.fti.uz/) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziynet.uz).

Научный руководитель: **Гулямов Гафур**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Расулов Рустам Явкачович**
доктор физико-математических наук, профессор

Кучкаров Кудрат Мамарасулович
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник

Ведущая организация: **Ташкентский государственный технический университет**

Защита состоится «_____» _____ 2022 г. в _____ часов на заседании Научного совета DSc.02/27.02.2020.FM/T.110.01 при Физико-техническом институте АН РУз. Адрес: Ул. Чингиза Айтматова 2б. 100084, г.Ташкент, Узбекистан. Административное здание Физико-технического института, зал конференций. Тел./факс: (+99871)235-42-91, e-mail: info.fti@uzsci.net.

С диссертацией можно ознакомиться в информационно-ресурсном центре Физико-технического института (зарегистрирован за №___). (Адрес: Ул. Чингиза Айтматова 2б. 100084, г. Ташкент, Узбекистан. Физико-технический институт. Тел./факс: (+99871) 235-42-91.

Автореферат диссертации разослан «___» _____ 2022 года
(протокол рассылки _____ от _____ 2022 года).

Х.К. Олимов
председатель научного совета по присуждению
учёных степеней, д.ф.-м.н., профессор

Ж.С. Ахатов
Учёный секретарь научного совета
по присуждению учёных степеней,
д.т.н., с.н.с.

Ш.Н. Усмонов
Председатель научного семинара
при Научном совете по присуждению
учёных степеней, д.ф.-м.н., с.н.с.

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В связи с развитием технологии производства одномерные полупроводниковые конструкции во всем мире исследование низкоразмерных квантовых нитей, квантовых точках и квантовых слоёв, одномерных структур, вызывают большой интерес. Разрабатываются потенциальные строительные блоки для различных оптических и электронных устройств, лазеров нанометрового размера, светоизлучающих диодов, полевых транзисторов, фотодетекторов и солнечных элементов. Особое внимание уделяется определению природы носителей тока в наноструктурах, связывая эти уникальные свойства с ограниченным движением электронов в размерах наноматериала и обеспечивая прецизионную работу таких устройств.

В мировых масштабах получение наноразмерных объектов и приборов на их основе в лабораторных условиях основано на успехах технологии молекулярно-лучевой эпитаксии, которая позволяет получать полупроводниковые тонкие слои с уникальными свойствами. В этом направлении разработка теоретических моделей полупроводниковых нанонитей с радиусом порядка нанометров, расчёт энергий и теоретические исследования энергетических спектров таких гетероструктур являются актуальными задачами физики полупроводников. В нанонитях узкозонных гетероструктур InP/InAs/InP зона проводимости является сильно непараболической. Создание математических моделей, способных объяснить экспериментальные данные, описывающие физические процессы, происходящие в нанопроволоках гетероструктур InP/InAs/InP, а также изучение свойств квазиодномерного электронного газа в гетероструктурах типа InP/InAs/InP (разработка математической модели, характеризующей энергетический спектр электронов нанонити с квантовой ямой конечной глубины с учётом непараболичности зоны проводимости, а также определение температурной зависимости термодинамической плотности состояний, концентрации носителей заряда, химического потенциала и энтропии и.т.п).

В стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы поставлены задачи, в том числе «..бесперебойное обеспечение экономики электроэнергией, активное внедрение технологий «Зелёной экономики» во все сферы, увеличение энергоэффективности экономики на 20 процентов»⁵. Для выполнения поставленных задач, в частности, строительство новых и модернизация существующих производств на основе возобновляемых источников энергии, в том числе разработка метода определения равновесной температуры стенки абсорбера в условиях падающей солнечной радиации на поверхность горизонтального плоского солнечного воздухонагревателя и температуры на выходе из нагревателя в условиях

⁵ Указ Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № УП-60 «О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы».

принудительной конвекции важно проводить научные исследования, направленные на решение этих вопросов, являющиеся востребованными.

Представленное диссертационное исследование, в определенной мере, способствует выполнению задач, изложенных в Указах Президента Республики Узбекистан № УП-60 от 28 января 2022 года «О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы», а также постановлениями Президента Республики Узбекистан № ПП-4779 «О дополнительных мерах по сокращению зависимости отраслей экономики от топливно-энергетической продукции, путем повышения энергоэффективности экономики и задействования имеющихся ресурсов» от 10 июля 2020 года и № ПП-4422 «Об ускоренных мерах по повышению энергоэффективности отраслей экономики и социальной сферы, внедрению энергосберегающих технологий и развитию возобновляемых источников энергии» от 22 августа 2019 года, в котором утверждены долгосрочные целевые параметры развития ВИЭ и план организационно-практических мер дальнейшего развития ВИЭ.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан. Данная исследовательская работа выполнена в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан – Ф2. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Степень изученности проблемы. Используя модели прямоугольных и цилиндрических нанонитей с потенциальными ямами конечной глубины были вычислены энергетические уровни, волновые функции, концентрации, плотности термодинамических состояний и энтропия электронного газа в котором принимали ряд известные зарубежные ученые такие как, Н.В. Ткач, И.В. Пронишин, А.М. Маханец (Украина), Б.Р. Наг, С. Гангопадхйай (Индия), А. Понсе (Франция), Э.П. Покатилов, В.А. Фоноберов, С.Н. Балабан (Молдова), Б.М. Фомин (Бельгия). И. Кнежевич, Э. Б. Рамайя, Ю.В. Тупиков (США), А.А. Варламов, А.В. Кавокин (Италия), Ю.М. Гальперин, А.Ю. В.М. Пудалов (Россия), К. Янссон, Э. Линд (Швеция).

При решении актуальных задач физике полупроводников по квантовым ямам, квантовым точкам и квантовым нитям и определении их энергетических состояний и термодинамических характеристик вынесли большой вклад известные ученые Узбекистана Р.А. Муминов, М.К. Бахадирханов, С. Зайнобиддинов, А.С. Саидов, К.П. Абдурахманов, Э.З. Имомов, Р.Я. Расулов и Ш. Отажонов.

Однако при вычислениях энергетических уровней и волновых функции электронов в прямоугольных и цилиндрических нанонитях не были учтены непараболичность дисперсии изменение эффективной массы электронов на границе потенциальная яма - потенциальный барьер и не были использованы термодинамический плотности состояний для объяснения температурной зависимость плотности энергетических состояний.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация.

Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научного проекта по фундаментальным исследованиям Физико-технического института АН РУз по теме: ВА-ФА-Ф-2-005 «Физические закономерности процессов переноса носителей тока в полупроводниковых структурах, полученных новыми технологическими подходами на основе Si , $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_4$ и широкозонных полупроводников» (2017-2020).

Целью исследования является исследование энергетического спектра, термодинамической плотности состояний, концентрации носителей заряда, химического потенциала и энтропии электронного газа в прямоугольных и цилиндрических нанонитях с потенциальными ямами и с непараболическим законом дисперсии.

Задачи исследования:

Анализ методов расчёта энергии электронов в модели потенциальной ямы конечной глубины на гетероструктуре $\text{InP}/\text{InAs}/\text{InP}$ и применение этих результатов для вывода упрощенных уравнений, определяющих энергетический спектр электронов в нанонитях;

сравнение энергетических уровней электронов в прямоугольных и цилиндрических нанонитях, определение зависимости энергии электронов от размеров этих образцов;

расчёт термодинамической плотности состояний, концентрации и энтропии электронного газа в полупроводниковых нанонитях;

исследование температурной зависимости химпотенциала электронного газа в нанонитях;

Объект исследования. Электронный газ в $\text{InP}/\text{InAs}/\text{InP}$ гетероструктурных нанонитях.

Предмет исследования. Энергетические уровни, термодинамические плотности состояний, концентрации и энтропия электронного газа в полупроводниковых нанонитях.

Методы исследований. Приближенные методы теоретической физики: численные методы, математическое моделирование, дифференциальное исчисление.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

Получены уравнения учитывающие непараболическость энергетических зон и конечность глубин потенциальных ям гетероструктур $\text{InP}/\text{InAs}/\text{InP}$ при расчетах спектра минизон и изменения эффективной массы электронов на гетеропереходе InP/InAs ;

впервые решением уравнения Шредингера определены энергетические спектры и волновые функций электронов прямоугольных и цилиндрических нанонитях;

с помощью энергетических спектров показано уменьшения эффективных масс электронов и дырок с ростом поперечных размеров нанонитей;

с помощью уравнения Шредингера определены энергетические спектры электронов в цилиндрических нанослоях с параболическими и непараболическими законами дисперсии;

в первые с использованием уравнений для полного числа частиц, получены, уравнения для концентрации электронов, термодинамической плотности состояний, энтропии и их температурная зависимость;

Практические результаты исследования. Приближенные методы и уравнения, определяющие параметры одномерного электронного газа для гетероструктур InP/InAs/InP: энергетический спектр, химический потенциал, концентрацию, термодинамическую плотность состояний, энтропию и др., могут быть использованы и для расчёта в случае нанонитей других гетероструктур, выращенных на основе A_3B_5 .

Достоверность результатов исследования обосновывается применением научно признанных методов и методологически апробированных математических методов при выполнении теоретических расчетов, а также соответствием теоретических результатов с экспериментальными данными, представленными в литературе.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научное значение результатов исследования заключается в определении количественных сведений об энергетических электронных уровнях в полупроводниковых нанонитях с различными геометрическими формами и размерами в разработке новых представлений о статистике электронов в таких структурах.

Практическое значение полученных результатов находит своё отражение в улучшении функциональных характеристик полевых транзисторов на основе структур с одномерным газом носителей заряда, при создании возможности квантовых каскадных лазеров и других полупроводниковых приборов.

Внедрение результатов исследования на основе научных результатов энергетического спектра электронного газа полученных на нано нитях полупроводниковых соединений A_3B_5 :

результаты температурной зависимости энергетических уровней, концентрации и термодинамической плотности состояний в полупроводниковых нанонитях, полученные в диссертации, используются при разработке полупроводниковых транзисторов акционерным обществом “Фотон” (справка объединения «Ўзэлтехсаноат» № 04-3/2717 от 22 декабря 2021 г). Применение результатов диссертации в технологических процессах позволили контролировать входные и выходные характеристики полевых транзисторов;

расчёты концентрации и термодинамической плотности состояний электронов в полупроводниковых нанонитях, разработанные в диссертации, были использованы при выполнении фундаментального проекта ОТ-Ф-74-“Исследования энергетических спектров сильнолегированных полупроводников и полупроводниковых твердых растворов” в Наманганском инженерно-технологическом институте (справка Наманганского инженерно-технологического института №310-024 от 7 февраля 2022 года). Использование результатов, полученных в диссертации при выполнении данного проекта, позволили объяснить влияние температуры на

энергетические спектры и энергетические плотности электронных состояний полупроводниковых растворов и сильнолегированных полупроводников.

Апробация результатов исследований. Результаты этого исследования обсуждались на 10 международных и 4 республиканских научных конференциях.

Публикации результатов исследования. По теме диссертации опубликован 21 научный труд, из них 7 статей в журналах, в том числе 4 в зарубежных и 3 в республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертационных работ.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, приложения, списка использованной литературы. Диссертация включает 70 рисунков, 5 таблиц и 100 страниц текста.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во Введении диссертации обоснована актуальность и востребованность исследования, изложена цель и задачи, определены объект и предмет исследований. Тема диссертации соответствует тематике ФТИ АН РУз. Изложена научная новизна и практическая значимость работы. Приводятся сведения о структуре диссертации и публикациях по выполненным работам.

Первая глава **“Выращивание полупроводниковых нанонитей и методы вычисления плотности состояний”** посвящена обзору работ по теме диссертации. Проанализированы работы, посвящённые изучению энергетических уровней, концентрации, термодинамической плотности состояний, энтропии и химпотенциала в полупроводниковых нанонитях. На основе проведённого обзора и анализа установлено состояние вопроса и проведена постановка задачи диссертации.

Во второй главе диссертации **“Энергетические уровни и волновые функции в прямоугольных полупроводниковых нанонитях”** получены энергетические уровни электронов и дырок и их волновые функции с учётом непараболичности энергетического закона дисперсии.

Используя граничные условия, учитывающие изменения эффективной массы электронов из решения уравнения для энергии электронов, получены следующие выражения:

$$E_y = \frac{\hbar^2}{2m_y L_y^2} \left(\pi n_y - 2 \text{Arcsin} \sqrt{\frac{\gamma E_y}{(\gamma - 1)E_y + V_0}} \right)^2, \quad E_z = \frac{\hbar^2}{2m_z L_z^2} \left(\pi n_z - 2 \text{Arcsin} \sqrt{\frac{\gamma E_z}{(\gamma - 1)E_z + V_0}} \right)^2 \quad (1)$$

Здесь

$$\gamma = \frac{m_b}{m_y}, \quad E(n_y, n_z) = E_y + E_z + E_{k_x} = E_y + E_z + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad (2)$$

Путем решения уравнения Шредингера с помощью метода конечных разностей получены следующие уравнения.

$$\frac{\psi(y + \delta y)}{m^*(y + \delta y/2)} = \left[\frac{2(\delta y)^2}{\hbar^2} (V(y) - E_y) + \frac{1}{m^*(y + \delta y/2)} + \frac{1}{m^*(y - \delta y/2)} \right] \psi(y) - \frac{\psi(y - \delta y)}{m^*(y - \delta y/2)} \quad (3)$$

$$\frac{\psi(z + \delta z)}{m^*(z + \delta z/2)} = \left[\frac{2(\delta z)^2}{\hbar^2} (V(z) - E_z) + \frac{1}{m^*(z + \delta z/2)} + \frac{1}{m^*(z - \delta z/2)} \right] \psi(z) - \frac{\psi(z - \delta z)}{m^*(z - \delta z/2)} \quad (4)$$

Непараболичность зоны учитывается выбором следующего вида эффективной массы:

$$m_{lnPi}(E) = m_{0lnPi} (1 + \alpha_{lnPi} (E - V)), \quad \alpha_{lnPi} = \frac{1}{E_{glnP}} \left(1 - \frac{m_i}{m_0} \right)^2, \quad \alpha_{lnAsi} = \frac{1}{E_{glnAs}} \left(1 - \frac{m_i}{m_0} \right)^2 \quad (5)$$

Здесь V - высота потенциального барьера, α - коэффициент непараболичности, m_i - эффективная масса электронов, m_0 - масса свободного электрона, E_g - ширина запрещённой зоны образца. Для анализа полученных результатов выберем нанонити гетероструктуры InP/InAs/InP. В таблице-1 приведены постоянные параметры для полупроводниковых образцов InAs и InP.

Таблица-1. Зонные параметры для полупроводниковых образцов InAs и InP.

Параметры Образцы	E_g (eV)	$\frac{m_e}{m_0}$	$\frac{m_{hh}}{m_0}$	$\frac{m_{lh}}{m_0}$	χ (eV)	α_e $\left(\frac{1}{eV}\right)$	α_{hh} $\left(\frac{1}{eV}\right)$	α_{lh} $\left(\frac{1}{eV}\right)$	Δ_0 (eV)	ΔE_C (eV)	ΔE_V (eV)
InAs	0.36	0.023	0.41	0.026	4.91	2.65	0.97	2.63	0.38	0.52	0.47
InP	1.35	0.077	0.65	0.096	4.39	0.63	0.09	0.6	0.11		

На рис.1 приведена зависимость энергии электронов прямоугольной нанонити от её размеров для параболического и непараболического законов дисперсии. На рис.2 приведена зависимость энергии электронов в прямоугольной нанонити с непараболическим законом дисперсии с потенциальной ямой конечной глубины от размеров нанонити. Расчёты проводились для электронов с эффективной массой внутри $0,023m_0$ и $0,077m_0$ вне нанонити.

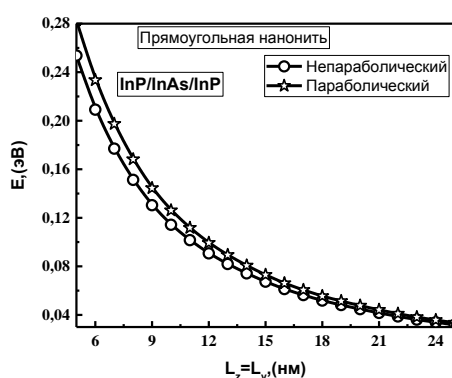


Рис.1. Зависимость энергии электронов прямоугольной нанонити с потенциальной ямой конечной глубины от её размеров.

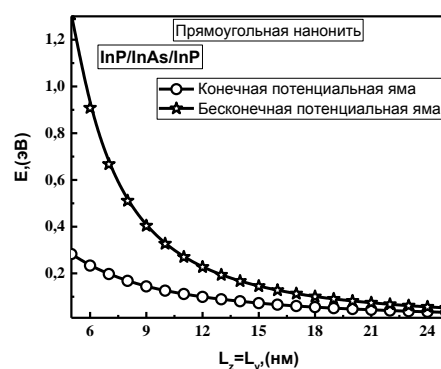


Рис.2. Зависимость энергии электронов прямоугольной нанонити с потенциальной ямой конечной и бесконечной глубины от её размеров.

Глубина потенциальной ямы равнялась $\Delta E_C = \chi_{InAs} - \chi_{InP} = 0,52$ (эВ). Расчёты проводили для квадратных нанонитей со сторонами от 5 nm до 25 nm. Для прямоугольной нанонити с размером 15 nm потенциальная яма с бесконечной глубиной даёт для энергии 0,14533 эВ, а для конечной глубины 0,07292 эВ. Если вместо модели бесконечной глубины использовать модель ямы конечной глубины, энергетические уровни сдвигались в нижние положения. Для прямоугольной нанонити со стороной 15 nm параболический закон дисперсии даёт значение 0,07292 эВ, непараболический 0,06738 эВ. Следовательно, не параболичность закона дисперсии понижает энергетические уровни в нанонитях. В общем случае с ростом поперечных размеров значения энергетических уровней нанонити понижаются.

Когда размеры прямоугольной нанонити близки друг к другу, её можно рассмотреть как квантовую точку. Наши результаты, полученные с помощью уравнения (1), сравним с результатами, полученными для квантовой точки на основе Ge/Si в работе⁶ с помощью спектров латеральной фотопроводимости (рис. 3). В эксперименте исследовались оптические переходы между энергетическими уровнями дырок и электронными состояниями образца.

⁶ Talochkin, A. B., Chistokhin, I. B., & Markov, V. A. Nanotechnology, 20(17), 175401.2009.

Энергия световых квантов $h\nu_{n_x, n_y, n_z}$ и энергетические уровни дырок связаны следующим соотношением.

$$h\nu_{n_x, n_y, n_z} = E_{g, Si} - V_0 + E_{n_x, n_y, n_z}, \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3 \dots$$

Здесь, $E_{g, Si}$ - ширина запрещённой зоны кремния (1,12 эВ), V_0 - глубина потенциальной ямы (0,84 эВ), E_{n_x, n_y, n_z} - энергетические уровни дырок. Наши результаты, полученные на основе модели потенциальной ямы конечной глубины, достаточно близки к экспериментальным данным.

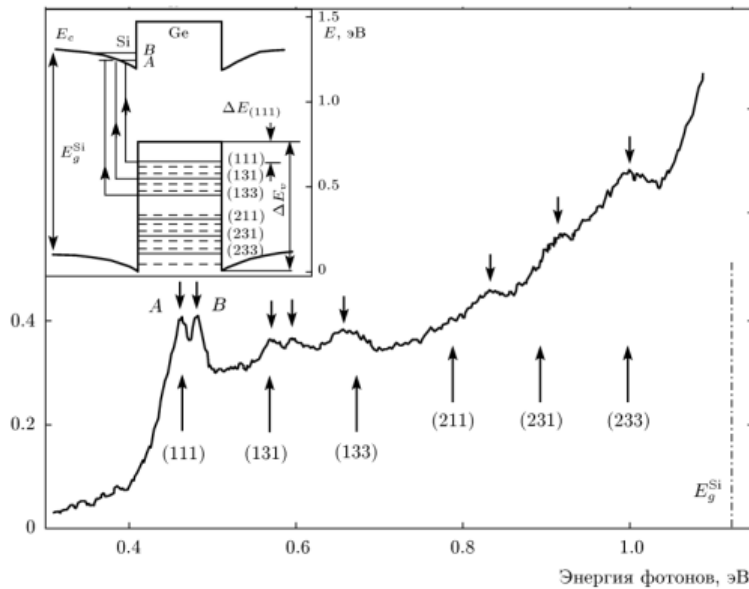


Рис.3. Результаты эксперимента для квантовой точки Ge/Si, полученной в работе [6]

Таблица-2. Результаты эксперимента и результаты наших расчётов.

Энергия поглощённого фотона	Результаты эксперимента, [6](эВ)	Результаты расчётов, (эВ)
$h\nu_{(1,1,1)}$	0.461	0.465
$h\nu_{(1,3,1)}$	0.571	0.563
$h\nu_{(1,3,3)}$	0.657	0.661
$h\nu_{(2,1,1)}$	0.833	0.819
$h\nu_{(2,3,1)}$	0.914	0.917
$h\nu_{(2,3,3)}$	1.000	1.015

Третья глава диссертации под названием “Энергетические уровни и волновые функции электронов и дырок в полупроводниковых цилиндрических нанонитях” посвящена определению энергетических уровней и волновых функций электронов и дырок в цилиндрических полупроводниковых нанонитях с потенциальными ямами бесконечной и конечной глубины с учётом непараболичности закона дисперсии энергии электронов.

Энергия электронов в потенциальной яме конечной глубины с разными эффективными массами вне и внутри нанонити цилиндрической формы находится путём решения уравнения Шредингера. Применяя соответствующие граничные условия, приходим к следующему трансцендентному уравнению:

$$\frac{J_l'(k_y R) K_l(\gamma_b R)}{J_l(k_y R) K_l'(\gamma_b R)} = \frac{\gamma_b m_y}{k_y m_b} \quad (6)$$

Здесь

$$k_y = \sqrt{\frac{2m_y}{\hbar^2} E}, \quad \gamma_b = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Если $k_A R$ и $\gamma_B R$ стремятся к нулю для состояния $l=0$, то функцию Бесселя с мнимым аргументом $I_l(\zeta)$ и функцию Макдональда $K_l(\zeta)$ можно разложить в ряд, ограничиваясь первыми членами. Это значительно уменьшает погрешность расчётов. Из уравнения (6) получаем следующее выражение для энергии электронов

$$E_{0,1} = \frac{4\hbar^2}{m_A R^2} \frac{\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R K_0(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R) + 2K_1(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R)}{\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R K_0(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R) + 4K_1(\sqrt{2m_B V_0 / \hbar^2} R)}. \quad (7)$$

Здесь V_0 -высота потенциального барьера, R -радиус нанонити, m_A, m_B -эффективная масса электронов внутри потенциальной ямы и в области потенциального барьера нанонити.

На рис.4 приведено сравнение теоретических расчётов с экспериментальными результатами для нанонитей на основе гетероструктур GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As/GaAs⁷. Из рисунка видно, что результаты расчётов удовлетворительно объясняют экспериментальные результаты. Решение уравнения методом конечных разностей для цилиндрических нанонитей приводит к следующему выражению:

$$\psi(\rho + \delta\rho) = \frac{8 \left\{ \frac{(\delta\rho m(x))^2}{\hbar^2} [V(\rho) - E] + m(\rho) \right\}}{\left\{ 2m(\rho) \left(2 + \frac{\delta\rho}{\rho} \right) - m(\rho + \delta\rho) + m(\rho - \delta\rho) \right\}} \psi(\rho) - \frac{\left\{ 2m(\rho) \left(2 - \frac{\delta\rho}{\rho} \right) + m(\rho + \delta\rho) - m(\rho - \delta\rho) \right\}}{\left\{ 2m(\rho) \left(2 + \frac{\delta\rho}{\rho} \right) - m(\rho + \delta\rho) + m(\rho - \delta\rho) \right\}} \psi(\rho - \delta\rho) \quad (8)$$

Используя выше приведённые выражения и выражение (5) для непараболичности зон нанонити гетероструктуры InP/InAs/InP, получим графики, приведённые в рисунках 5 и 6. При расчётах эффективной массы электронов использовали внутри нити значение $0,023m_0$ и вне нити $0,077m_0$. Глубина потенциальной ямы $\Delta E_C = \chi_{InAs} - \chi_{InP} = 0,52$ (эВ). При этом радиус нанонити изменялся от 5 nm до 15 nm. Для цилиндрической нанонити с бесконечной потенциальной ямой с радиусом 10 nm энергия электрона равна 95,79 мэВ, причем с конечной глубины уровень изменяется до 53,39 мэВ. Если глубину потенциальной ямы сделать конечной, то энергетические уровни смещаются вниз. В случае цилиндрической нанонити с радиусам 10 nm для непараболического закона дисперсии уравнение (6) даёт значение 53,397 мэВ, а уравнение (7) величину 59,379 мэВ и уравнение (8) значение

⁷ Dimberger, F., Kammermeier, M., König, J., Forsch, M., Faria Junior, P. E. Applied Physics Letters, 114(20), 202101. 2019.

56,337 мэВ. Как видно из рисунка 5 при малых радиусах нанонити энергии электронов в потенциальной яме с конечной глубиной и потенциальной яме бесконечной глубины сильно отличаются. При больших радиусах эти уровни сближаются. На рис.6 сравниваются значения энергий, полученные из решения уравнений (6), (7) и (8). Приближенные выражения, полученные нами, дают результаты, близкие к точным решениям. На рис.7 приведена зависимость энергии электронов для прямоугольной и цилиндрической нанонити от площади поперечного сечения. На рис.8-13 приведены волновые функции 2D электронов для цилиндрической нанонити гетероструктур InP/InAs/InP.

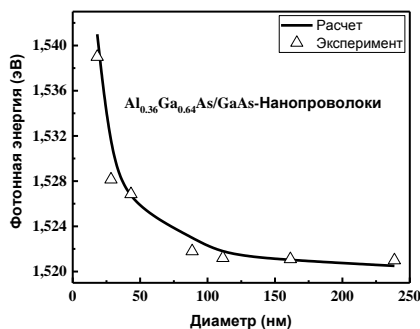


Рис.4. Зависимость энергетических уровней электронов от диаметра нанонитей гетероструктур на основе GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As/GaAs

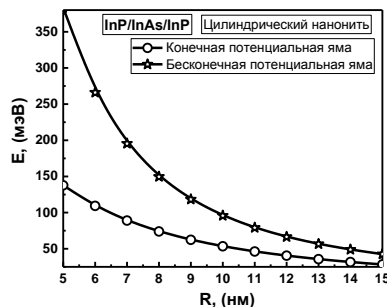


Рис.5. Зависимость энергии электронов в цилиндрической и прямоугольной нанонити с конечной и бесконечной глубиной потенциальной ямы.

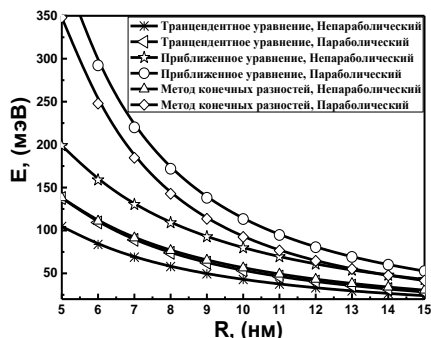


Рис.6. Зависимость энергии электронов с параболической и непараболической дисперсий цилиндрической нанонити от её радиуса.

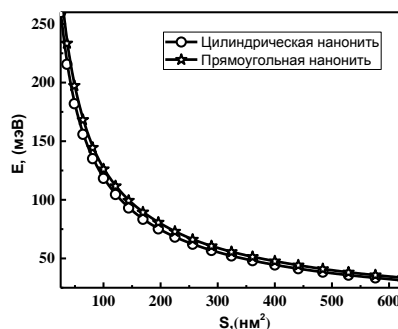


Рис.7. Зависимость энергии электронов в цилиндрической и прямоугольной нанонити с конечной глубиной потенциальной ямы от её площади.

Энергетические уровни и волновые функции электронов в полупроводниковых цилиндрических нанотрубках. Решая уравнение Шредингера внутри нанотрубки цилиндрической формы с потенциальными барьерами и потенциальной ямой конечной глубины с учётом изменения массы электронов, используя соответствующие граничные условия, получаем следующее трансцендентное уравнение:

$$\frac{\frac{m_A}{m_B} J_l(k_A R_1) I_l'(\gamma_B R_1) - J_l'(k_A R_1) I_l(\gamma_B R_1)}{\frac{m_A}{m_B} J_l(k_A R_2) K_l'(\gamma_B R_2) - J_l'(k_A R_2) K_l(\gamma_B R_2)} = \frac{N_l'(k_A R_1) I_l(\gamma_B R_1) - \frac{m_A}{m_B} N_l(k_A R_1) I_l'(\gamma_B R_1)}{N_l'(k_A R_2) K_l(\gamma_B R_2) - \frac{m_A}{m_B} N_l(k_A R_2) K_l'(\gamma_B R_2)} \quad (9)$$

С помощью этого уравнения можно вычислить энергию электронов и дырок в цилиндрической нанотрубке с потенциальной ямой конечной глубины. На рис.14 приведена зависимость энергии электронов с

параболическим и непараболическим законом дисперсии от толщины наносля. В нанослях также уровни с непараболическим законом дисперсии располагаются ниже чем уровни с параболическим и непараболическим законом дисперсии от внутреннего радиуса наносля. Из графика видно, что изменение внутреннего радиуса, обусловленного изменением толщины наносля, слабо влияет на энергетические уровни наносля (рис.15).

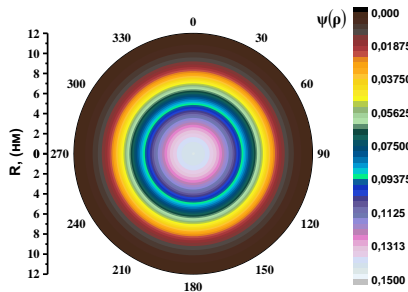


Рис.8. Зависимость волновой функции электронов нанонити состояния (0,0) от размеров ямы.

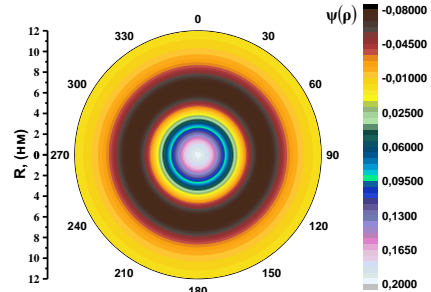


Рис.9. Зависимость волновой функции электронов нанонити состояния (0,1) от размеров ямы.

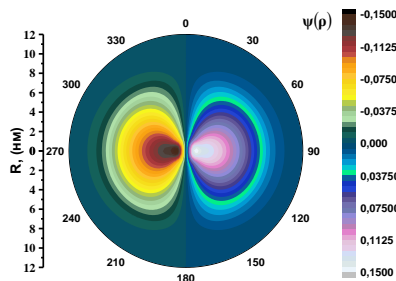


Рис.10. Зависимость волновой функции электронов нанонити состояния (+1,0) от размеров ямы.

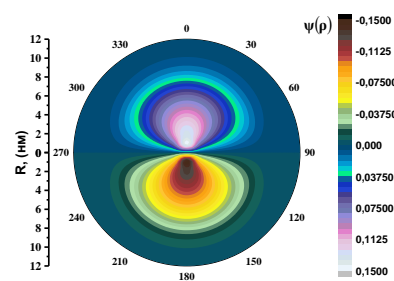


Рис.11. Зависимость волновой функции электронов нанонити состояния (-1,0) от размеров ямы.

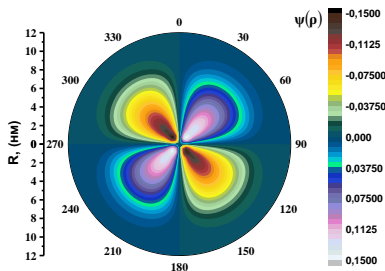


Рис.12. Зависимость волновой функции электронов нанонити состояния (+2,0) от размеров ямы.

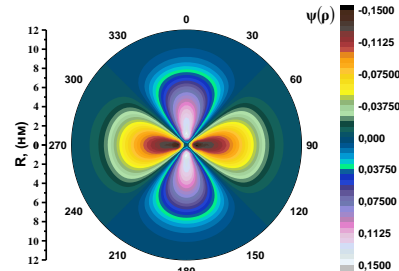


Рис.13. Зависимость волновой функции электронов нанонити состояния (-2,0) от размеров ямы.

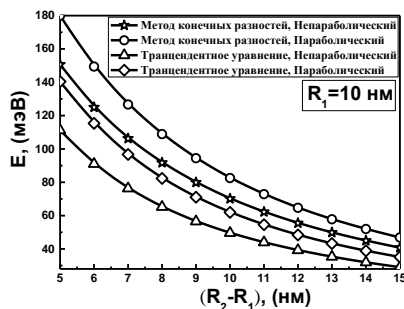


Рис.14. Зависимость энергии электронов цилиндрической наносля потенциальной ямы конечной глубины с параболическим и непараболическим законом дисперсии от радиуса слоя.

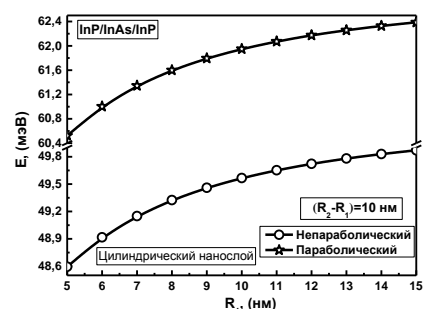


Рис.15. Зависимость энергии электронов цилиндрической наносля потенциальной ямы конечной глубины с параболическим и непараболическим законом дисперсии от внутреннего радиуса наносля.

Четвертая глава диссертации, под названием “Статистика электронов в полупроводниковых нанонитях”. В этой главе получены приближенные аналитические выражения для концентрации, термодинамической плотности состояний и энтропии электронного газа в полупроводниковых нанонитях.

Концентрация электронов в полупроводниковых нанонитях. При использовании уравнения для полного числа частиц получаем следующие выражения для концентрации электронов в нанонитях:

$$n_0 = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}, \quad n_L = n_0 \sum_{n,l} \int_{E_{n,l}}^{\infty} \left(e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1 \right)^{-1} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{n,l}}} \quad (10)$$

Здесь, введено обозначение $n_0 = \sqrt{2m/\pi^2 \hbar^2}$ где m - эффективная масса электронов, \hbar - постоянная Планка.

Известно, что функция распределения Ферми-Дирака при $T \rightarrow 0$ равно 1 при $\mu > E$ и равна 0 при $\mu < E$. Это означает, что состояния с $\mu > E$ заполнены электронами, а для $\mu < E$ - пустые. При повышении температуры резкий скачок функции Ферми-Дирака от 1 к 0 начинает искривляться. С ростом температуры это искривление происходит на несколько величин kT . В этом случае электроны переходят из заполненных состояний в пустые уровни. При низких температурах плотности электронных состояний на энергетических уровнях очень большие, а при высоких температурах за счёт расплывания энергетических уровней плотность энергетических электронных состояний уменьшается. По этой причине при высоких температурах пики сглаживаются (рис.16). В этом выражении интеграл аналитически не вычисляется, поэтому будем вычислять его приближённо. Здесь интеграл есть интегральная функция Ферми для состояния $j=-1/2$. Для вычисления интеграла при любой температуре воспользуемся приближенными выражениями для функции интеграла Ферми с $j=1/2$. Тогда для концентрации электронов получим следующие выражения:

$$n_L \approx \begin{cases} n_0 \sqrt{kT} \sum_{n,l} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}}, & -191 > \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \\ 16n_0 \sqrt{\pi kT} \sum_{n,l} \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-2} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}}, & -191 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} < 1,33 \\ n_0 \sqrt{kT} \sum_{n,l} \sqrt{\left(\frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \right)^{-3} \left(2 \left(\frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \right)^2 - \frac{\pi^2}{12} \right)}, & 1,33 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \end{cases} \quad (11)$$

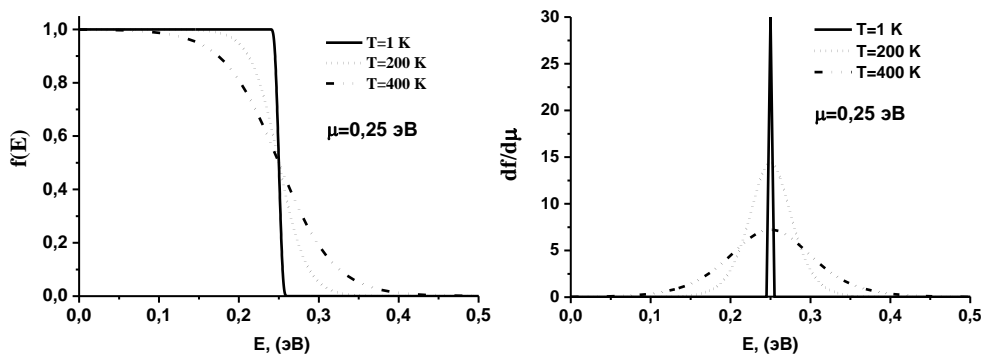


Рис.16. Функция Ферми-Дирака и её производная по энергии.

Используя это выражение, можно определить концентрацию электронного газа в нанонити. Здесь мы вычислим концентрации электронов в прямоугольной нанонити, на основе гетероструктуры InP/InAs/InP с размерами 18 и 12,8 нм в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы ($E_{(1,1)}=0,15$ эВ, $E_{(2,1)}=0,3$ эВ, $E_{(1,2)}=0,45$ эВ, $E_{(3,1)}=0,55$ эВ, $E_{(1,3)}=0,6$ эВ). На рис.17 приведена зависимость концентрации электронного газа от химического потенциала. При пересечении линии с каждым энергетическим уровнем наблюдается излом кривой. Это соответствует заполнению одного уровня электронами и их переход на следующий уровень. Как видно из рис.17, с ростом температуры изломы кривых сглаживаются. Это обусловлено тем, что с ростом температуры химический потенциал электронного газа уменьшается.

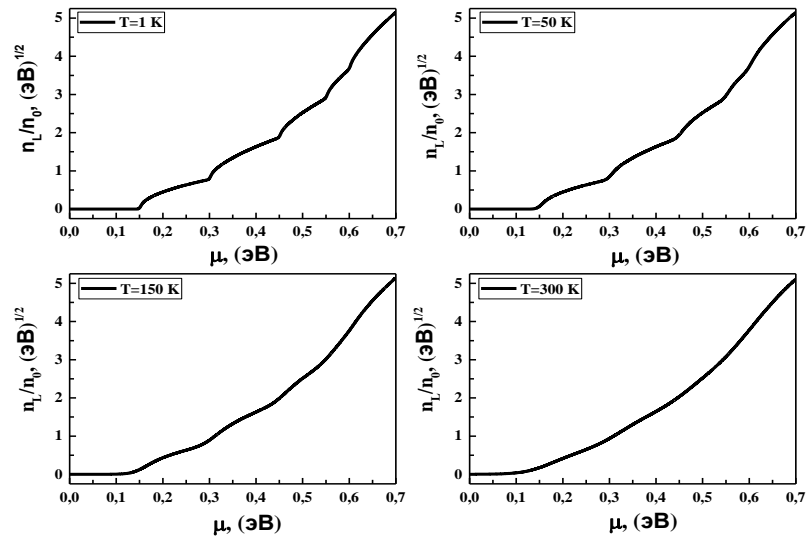


Рис.17. Зависимость концентрации электронов в нанонитях от химического потенциала при различных температурах.

Термодинамическая плотность состояний электронов в полупроводниковых нанонитях. Для изучения температурной зависимости энергетических состояний электронов в полупроводниковых нанонитях воспользуемся термодинамической плотностью состояний. Используя выражение (10), находим термодинамическую плотность состояний в видно:

$$N(\mu, T) = \frac{\partial n_L}{\partial \mu} = \frac{n_0}{4kT} \sum_{n,l} \int_{E_{n,l}}^{\infty} \cosh\left(\frac{E - \mu}{2kT}\right)^{-2} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{n,l}}} \quad (12)$$

Используя приближенные значения (11), получим следующие выражения:

$$N(\mu, T) \approx \begin{cases} \frac{n_0}{\sqrt{kT}} \sum_{n,l} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}}, & -191 > \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \\ 16n_0 \sqrt{\frac{\pi}{kT}} \sum_{n,l} \left(\left(e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} - 4 \right) \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-3} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right), & -191 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} < 1,33 \\ \frac{n_0}{8} \sum_{n,l} \frac{(\pi kT)^2 + 8E_{n,l}^2 - 16\mu E_{n,l} + 8\mu^2}{(\mu - E_{n,l})^{5/2}}, & 1,33 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \end{cases} \quad (13)$$

На рис. 18 приведена зависимость термодинамической плотности состояний электронного газа полупроводниковой нанонити от химического

потенциала носителей при температурах 20, 100, 200 и 300 К. Здесь мы вычислим концентрации электронов в прямоугольной нанонити, на основе гетероструктуры InP/InAs/InP с размерами 18 и 12,8 нм в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы ($E_{(1,1)}=0,15$ эВ, $E_{(2,1)}=0,3$ эВ, $E_{(1,2)}=0,45$ эВ, $E_{(3,1)}=0,55$ эВ, $E_{(1,3)}=0,6$ эВ). При пересечении каждого из уровней наблюдаются изломы линий, которые обусловлены переходами с одной минизоны в следующую. При низких температурах наблюдаются резкие пики на графиках. С повышением температуры эти пики постепенно сглаживаются. Сглаживание пиков плотности состояний зависит от температуры и разности энергий между соседними энергетическими уровнями. Расстояние между уровнями 4 и 5 наименьшее, и уровень 4 при 200 К почти полностью сглаживается. Расчёты показали, что при $\Delta E_{i,j} \rightarrow \Delta T$ пики на графиках полностью исчезают. Это можно объяснить изменениями химпотенциала, который сначала растёт, а затем с падает и при высоких температурах почти линейно уменьшается с ростом температуры.

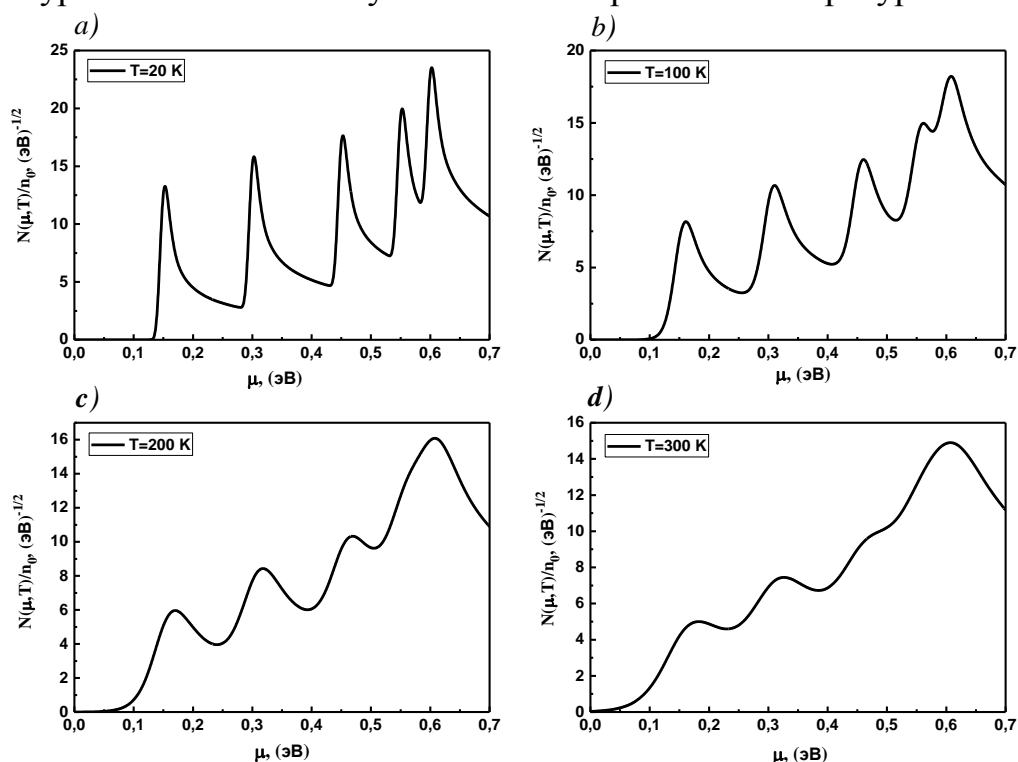


Рис.18. Зависимость термодинамической плотности состояний электронов от химпотенциала в нанонитях при различных температурах.

Энтропия электронного газа в полупроводниковых нанонитях. Энтропия на единицу электрона в полупроводниковой нанонити определим в следующем виде⁸:

$$s = \left(\frac{\partial S}{\partial n_L} \right)_T = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{n_L} = \left(\frac{\partial n_L}{\partial T} \right)_\mu \left(\frac{\partial n_L}{\partial \mu} \right)_T^{-1} \quad (14)$$

Пользуясь приближенным выражением (11), получим следующие выражения для энтропии на один электрона.

⁸ A.A. Varlamov, A.V. Kavokin, Y.M. Galperin. Physical Review B, 93(15). (2016).

$$s \approx \begin{cases} \sum_{n,l} \left[\left(\frac{k}{2} - \frac{\mu - E_{n,l}}{T} \right) e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \left(\sum_{n,l} e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-1} \right], & -191 > \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \\ \frac{\sum_{n,l} \left[\left[\left(\frac{k}{2} + \frac{\mu - E_{n,l}}{T} \right) e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} + 4 \left(\frac{k}{2} - \frac{\mu - E_{n,l}}{T} \right) e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right] \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-3} \right]}{\sum_{n,l} \left[\left(e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \left(4 - e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right) \right) \left(4 + e^{\frac{\mu - E_{n,l}}{kT}} \right)^{-3} \right]}}, & -191 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} < 1,33 \\ \frac{4k\pi^2}{3} \sum_{n,l} \left(\frac{kT}{E_{n,l} - \mu} \right)^{3/2} \sum_{n,l} \left[\left(\frac{kT}{E_{n,l} - \mu} \right)^{5/2} \left(\pi^2 + 8 \left(\frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \right)^2 \right) \right]^{-1}, & 1,33 < \frac{\mu - E_{n,l}}{kT} \end{cases} \quad (15)$$

Энтропия на один электрон полупроводниковой нанонити определяется выражением (14). Используя выше приведённое выражение (11), получили приближенное выражение (15). Выражение (15) определяет приближенное значение энтропии электрона в зависимости от его химпотенциала (рис.19). Здесь мы вычислим энтропии электронов в прямоугольной нанонити, на основе гетероструктуры InP/InAs/InP с размерами 18 и 12,8 нм в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы ($E_{(1,1)}=0,15$ эВ, $E_{(2,1)}=0,3$ эВ, $E_{(1,2)}=0,45$ эВ, $E_{(3,1)}=0,55$ эВ, $E_{(1,3)}=0,6$ эВ). Из графиков видно, что энтропия электрона во всех энергетических уровнях имеет одинаковые значения, и не зависит от температуры. Из выражения (15) следует; что при $\mu = E_{n,l}$ энтропия на один электрон равна $s \approx 5k/6$. Из рис.19 видно, что с ростом температуры пики графиков сглаживаются. Это обусловлено линейным изменением химпотенциала электронов в нанонитях с увеличением температуры.

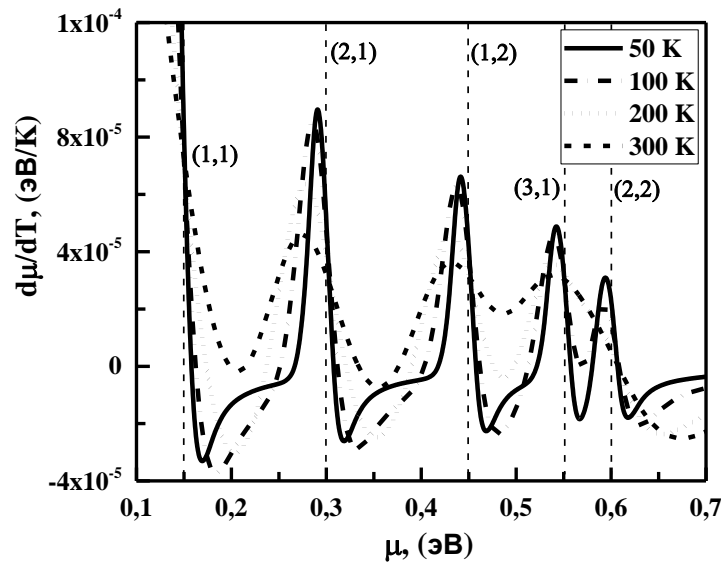


Рис.19. Зависимость энтропии электрона от его химпотенциала при различных температурах.

Выводы

В диссертационной работе исследованы энергии, волновые функции, концентрации, термодинамические плотности состояний и энтропия электронов в полупроводниковых нанонитях и цилиндрических нанослоях.

Основные результаты, полученные в диссертации:

1. С помощью модели конечной потенциальной ямы двумя различными способами вычислены энергетические уровни и волновые функции электронов в гетероструктуре InP/InAs/InP в нанонитях различной формы для состояний непараболической дисперсии энергии с учётом измерения эффективной массы на переход InP/InAs.

2. Установлено, что энергетические уровни электронов в нанонитях с непараболической дисперсией расположены ниже по сравнению с уровнями с параболической дисперсией.

3. Получено уравнение, определяющее первый энергетический уровень электрона в цилиндрических нанонитях с потенциальной ямой конечной глубины.

4. Показано, что эффективные массы электронов и дырок изменяются с изменением размеров нанонити.

5. Размещение электронов на энергетических уровнях в прямоугольных и цилиндрических нанонитях с потенциальной ямой объяснено с помощью 2D графиков.

6. Установлено, что энергетические уровни электронов для прямоугольных и цилиндрических нанонитей с одинаковыми поперечными сечениями имеют очень близкие значения.

7. Установлено, что изменения внутреннего радиуса цилиндра при постоянной толщине цилиндрического нанослоя очень слабо влияют на положение энергетических уровней электронов.

8. Выведены выражения, определяющие концентрации, термодинамические плотности состояний и энтропию электронов в полупроводниковых нанонитях и проанализированы их зависимости от температуры.

**SCIENTIFIC COUNCIL AWARDING SCIENTIFIC DEGREES
DSc.02/27.02.2020.FM/T.110.01 PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE
ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF UZBEKISTAN**

PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE

DAVLATOV ABROR BORIJON UGLI

**ENERGY SPECTRUM AND STATISTICS OF ELECTRONIC GAS IN
NANOWIRES OF SEMICONDUCTOR COMPOUNDS A_3B_5 .**

01.04.10 – Physics of semiconductors

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

Tashkent – 2022

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2021.4.PhD/FM478.

Dissertation has been prepared at Physical-technical institute of Uzbekistan Academy of Sciences.
The abstract of the dissertation is posted in three languages (uzbek, russian, english (resume)) on the website (www.fti.uz) and the «Ziyonet» Information and educational portal (www.ziyonet.uz).

Scientific supervisor: **Gulyamov Gafur**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Official opponents: **Rasulov Rustam Yavkachovich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Kuchqarov Kudrat Mamarasulovich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior
Researcher

Leading organization: **Tashkent State Technical University**

The defense will be take «___» _____ 2022 at ___ at the meeting of Scientific council DSc.02/27.02.2020.FM/T.110.01 at the Physical-technical institute Academy of Sciences of RUz. Address: Chingiz Aytmatov str. 2b, 100084-Tashkent, Uzbekistan. Conference hall of the Physical-technical Institute. Phone/Fax: (99871) 235-42-91, e-mail: info.fti@uzsci.net.

Dissertation is possible to review in Information-resource centre at Physical–technical Institute (is registered № ___). Address: Chingiz Aytmatov str. 2b, 100084-Tashkent, Uzbekistan. Physical-technical Institute. Phone/Fax: (99871) 235-42-91.

Abstract of the dissertation was distributed on «___» _____ 2022 year. (mailing report № ___ on «___» _____ 2022 year).

Kh. K. Olimov
Chairman of the Scientific Council
on Award of Scientific Degrees,
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

J.S. Akhatov
Scientific Secretary of the Scientific
Council on Award of Scientific Degrees,
Doctor of Technical Sciences, Senior Researcher

Sh.N. Usmonov
Chairman of the Scientific Seminar at the
Scientific Council for the Awarding of Scientific Degree,
Doctor of Physical and Mathematical Sciences,
Senior Researcher

INTRODUCTION (abstract of PhD thesis)

The aim of the study is to study the energy, thermodynamic density of states, concentration of charge carriers, chemical potential and entropy of the electron gas in rectangular and cylindrical nanowires with potential wells and with a nonparabolic electron energy dispersion law.

Задачи исследования:

Analysis of methods for calculating the energy of electrons in the model of a finite depth potential well on an InP/InAs/InP heterostructure and applying these results to derive simplified equations that determine the energy spectrum of electrons in nanowires;

comparing the energy levels of electrons in rectangular and cylindrical nanowires, determining the dependence of the electron energy on the size of these samples;

calculation of thermodynamic density of states, concentration and entropy of electron gas in semiconductor nanowires;

study of the temperature dependence of the chemical potential of the electron gas in nanowires;

Object of study. Electron gas in InP/InAs/InP heterostructural nanowires.

Subject of study. Energy levels, thermodynamic densities of states, concentrations and entropy of electron gas in semiconductor nanowires.

Research methods. Approximate methods of theoretical physics: numerical methods, mathematical modeling, differential calculus.

The scientific novelty of the research is as follows:

Equations are obtained that take into account the nonparabolic nature of the energy bands and the finiteness of the depths of the potential wells of the InP/InAs/InP heterostructures when calculating the spectrum of minibands and the change in the effective mass of electrons at the InP/InAs heterojunction;

in the first, the energy spectra and wave functions of electrons in rectangular and cylindrical nanowires were determined by solving the Schrödinger equation;

using energy spectra, a decrease in the effective masses of electrons and holes with an increase in the transverse dimensions of nanowires is shown;

using the Schrödinger equation, the energy spectra of electrons in cylindrical nanolayers with parabolic and non-parabolic dispersion laws are determined;

in the first, using equations for the total number of particles, equations for the electron concentration, thermodynamic density of states, entropy and their temperature dependence are obtained;

Practical results of the study. Approximate methods and equations that determine the parameters of a one-dimensional electron gas for InP/InAs/InP heterostructures: energy spectrum, chemical potential, concentration, thermodynamic density of states, entropy, etc., can also be used to calculate in the case of nanowires of other heterostructures grown on the basis of A_3B_5 .

Reliability of the results of the study is justified by the use of scientifically recognized methods and methodologically proven mathematical methods when performing theoretical calculations, as well as the correspondence of theoretical results with experimental data presented in the literature.

Scientific and practical significance of the research results.

The scientific significance of the results of the study lies in the determination of quantitative information about the energy electronic levels in semiconductor nanowires with various geometric shapes and sizes in the development of new ideas for the statistics of electrons in such structures.

The practical significance of the results obtained is reflected in the improvement of the functional characteristics of field-effect transistors based on structures with a one-dimensional charge carrier gas, while creating the possibility of quantum cascade lasers and other semiconductor devices.

Implementation of the research results based on the scientific results of the energy spectrum of the electron gas obtained on nanowires of semiconductor compounds A_3B_5 :

the results of the temperature dependence of energy levels, concentration and thermodynamic density of states in semiconductor nanowires, obtained in the dissertation, are used in the development of semiconductor transistors by the Foton joint-stock company (certificate of the Uzeltekhsanoat association No. 04-3/2717 dated December 22, 2021). The application of the results of the dissertation in technological processes made it possible to control the input and output characteristics of field-effect transistors;

the calculations of the concentration and thermodynamic density of states of electrons in semiconductor nanowires, developed in the dissertation, were used in the implementation of the fundamental project OT-F-74-“Studies of the energy spectra of heavily doped semiconductors and semiconductor solid solutions” at the Namangan Institute of Engineering and Technology (reference Namangan Engineering and Technology Institute No. 310-024 dated February 7, 2022). The use of the results obtained in the dissertation during the implementation of this project made it possible to explain the effect of temperature on the energy spectra and energy densities of electronic states of semiconductor solutions and heavily doped semiconductors.

Approbation of research results. The results of this study were discussed at 10 international and 4 republican scientific conferences.

Publication of research results. On the topic of the dissertation, 21 scientific works were published, of which 7 articles were in journals, including 4 in foreign and 3 in republican journals recommended by the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan for publishing the main scientific results of dissertations.

The structure and scope of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, an appendix, a list of references. The dissertation includes 70 figures, 5 tables and 100 pages of text.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

1. Gulyamov G., Davlatov A.B., Juraev Kh.N. Concentration, thermodynamic density of states, and entropy of electrons in semiconductor nanowires // *Low Temperature Physics*, **48**. 148 (2022) (№3, Scopus, IF: 1.570).
2. Gulyamov G., Davlatov A.B., Inoyatov S.T., Makhmudov S.A. Calculation of the energy levels and wave functions of electrons in nanowires by the shooting method // *Journal of Applied Science and Engineering*, **25**. 1, 31-36, (2022). (№3, Scopus, IF: 0.36).
3. Гулямов Г., Давлатов А.Б. Концентрация электронов в полупроводниковых нанонитях // *Научный вестник НамГУ*. **5**. 16-22, (2021). (01.00.00, №14).
4. Gulyamov G., Gulyamov A.G., Davlatov A.B., Juraev Kh.N. Energy levels in nanowires and nanorods with a finite potential well // *Advances in Condensed Matter Physics*. **2020**. 4945080, 12 p. (2020). (№3, Scopus, IF: 1.845).
5. Gulyamov G., Gulyamov A.G., Davlatov A.B., Shahobiddinov B.B. Electron energy in rectangular and cylindrical quantum wires // *Journal of Nano and Electronic Physics*. **12**. 4, 04023-1-5 (2020). (№3, Scopus, IF: 1.0).
6. Гулямов Г., Давлатов А.Б., Жураев Х.Н. Статистика электронов в полупроводниковых нанонитях // *Uzbek Journal of Physics*. Vol. **22**. 5, 275-281, (2020). (01.00.00, №5).
7. Gulyamov A.G., Gulyamov G., Baymatov P., Davlatov A.B. Effect of temperature and band nonparabolicity on density of states of one dimensional electron gas // *Scientific reports of Bukhara State University*. **4**. 7-11, (2018). (01.00.00, №3).

II бўлим (II часть; part II)

8. Гулямов Г., Давлатов А.Б. Вычисление энергетических уровней и волновых функций электронов в нанонити методом конечных разностей // *Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2021»*. 12-23 Апр 2021. Москва, 2021г.
9. Давлатов А.Б. Яримўтказгичли, тўғри тўртбурчакли чекли чуқур потенциал ўрали наноипда электронлар энергияси // *Иқтисодиёт тармоқлари ва ижтимоий соҳанинг энергия самарадорлигини оширишга қаратилган автоматлаштириш ва энергетика муаммоларни ечишда илғор инновацион технологиялар ва таълимнинг ўрни*” мавзусида халқаро илмий-амалий конференция. Наманган. 24-25 июн 2021 йил. 90-93.
10. Гулямов Г., Давлатов А.Б. Яримўтказгичли цилиндрик наноқатламларда электронлар энергия сатҳлари ва тўлқин функциялари // *Яримўтказгичлар физикаси, микро- ва наноэлектрониканинг фундаментал ва амалий муаммолари мавзусидаги I-халқаро анжуман*. Тошкент-2021. 28-29 октябрь. 101-103.

11. Гулямов Г., Давлатов А.Б., Ўринбоев Д.Р. Яримўтказгичли наноипларда электронлар энтропияси // Fotoenergetikada nanostrukturali yarimo'tkazgich materiallar. II xalqaro ilmiy anjumani. 19-20 noyabr 2021 yil. Toshkent. 171-174.

12. Гулямов Г., Давлатов А.Б., Ўринбоев Д.Р. Яримўтказгичли наноипларда электронлар энергия сатҳлари ва тўлқин функциялари // Яримўтказгичли микроэлектроника, нанотехнологиялар ва ноанъанавий энергия манбалари физикасининг долзарб муаммолари мавзусидаги республика илмий-амалий анжумани. Андижон–2021. 10-11.

13. Гулямов Г., Гулямов А., Давлатов А. Энергетические уровни в цилиндрической квантовой нанонити с конечной потенциальной ямой // “Тенденции развития современной физики полупроводников: проблемы, достижения и перспективы” 2020. Ташкент 2020 г. 101-106.

14. Гулямов А.Г., Давлатов А.Б. Энергии электронов в квантовых нитях // Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2020». Москва 2020г.

15. Гулямов А.Г., Давлатов А.Б. Энергетические уровни в цилиндрических квантовых нотрубках с конечными потенциальными ямами // Fundamental and applied problems of physics. Ташкент 2020 г. 182-187.

16. Гулямов А.Г., Давлатов А.Б., Жураев Х.Н. Энергетические уровни в цилиндрических квантовых нанотрубках с конечными потенциальными ямами // Международная школа-конференция молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики», 04-06 ноября 2020 г. Минск, 2020. 31-32.

17. Гулямов Г., Давлатов А.Б. Статистика электронов в полупроводниковых нанонитях // “Замонавий микроэлектрониканинг ривожланишида фан, таълим ва инновация интеграцияси” республика илмий-услугий анжумани материаллари, Андижон 2020 йил, 24-25 декабрь. 223-226.

18. Гулямов Г., Гулямов А., Давлатов А.Б. Чекли потенциал ўрали цилиндрик квант ипда электрон энергияси // Международной научно-практической конференции «наука и образование в современном мире: вызовы XXI века» Нур-султан– 2019. 84-88.

19. Gulyamov G., Gulyamov A.G., Davlatov A.B. Silindrik va to'g'ri burchakli kvant iplarda elektron energiyasi // Современные проблемы физики полупроводников. Нукус-2019. 125-128.

20. Байматов П., Пўлатов А., Давлатов А.Б. Энергетические уровни дырок в квантовой точке Si/Ge в модели барьера конечной высоты // XX международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых “Ломоносов” Москва 2013г. 304-307.

21. Байматов П., Давлатов А.Б. Квантование уровней дырок в квантовой точке Si/Ge в модели барьера конечной высоты // “Физика фанининг ривожиди истедодли ёшларнинг ўрни” (Республика илмий-амалий конференцияси) Тошкент 2013й. 75-78.

Авторефератнинг ўзбек, рус ва инглиз тилларидаги нусхалари
«Тил ва адабиёт таълими» таҳририятида таҳрирдан ўтказилди.
(26.08.2022 йил)

Босишга рухсат этилди: 29.08.2022 йил
Бичими 60x44 ¹/₁₆, «Times New Roman»
гарнитурда рақамли босма усулида босилди.
Шартли босма табоғи 2,5. Адади: 100. Буюртма: № _____.

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

«АКАДЕМИЯ НОШИРЛИК МАРКАЗИ»
Давлат унитар корхонасида чоп этилди.

