

Davlatov Abror
Namangan davlat universiteti dotsenti
E-mail: litsey111213@gmail.com
Abdulazizov Bahrom
Namangan davlat universiteti professori
O'rinboyev Dostonbek
Namangan davlat texnika universiteti doktoranti
UO'T: 621.315.592
+99899 977 06 09

GaAs/InP/GaAs nanoipidagi InAs nanonuqtaning elektron va kovak energiya sathlari va to'liqin funksiyalarining hisoblanishi

Annotatsiya: Ushbu maqolada yarimo'tkazgichli GaAs/InP/GaAs nanoipida joylashgan InAs nanonuqtaning elektron va kovak energiya satxlari hamda to'liqin funksiyalari Shredinger tenglamasini analitik va chekli orttirmalar usuli yordamida yechish orqali tadqiq qilindi. Hisoblashlarda energiya zonalarining noparabolikligi hisobga olindi va Nelson modeli asosida effektiv massalarning energiyaga bog'liqligi kiritildi. Olingan natijalar shuni ko'rsatadiki, nanonuqta o'lchami hamda uning nanoip devoriga nisbatan joylashuvi elektron va kovaklarning energetik sathlariga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Ushbu tadqiqot natijalari nanoip asosidagi yuqori samarali optoelektron qurilmalar, infraqizil lazerlar, fotodetektorlar, kvant kompyuter elementlari hamda oraliq diapazonli quyosh batareyalarini ishlab chiqishda muhim ahamiyat kasb etadi.

Kalit so'zlar: yarimo'tkazgichli nanoip, nanonuqta, Shredinger tenglamasi, chekli orttirmalar usuli, energiya sathlari, to'liqin funksiyasi, noparaboliklik, optoelektron qurilmalar.

Давлатов Аброр
Наманганский государственный университет Доцент
E-mail: litsey111213@gmail.com
Абдулазизов Бахром
Наманганский государственный университет Профессор
Ўринбоев Достон
Наманганский государственный технический университет Докторант
УДК: 621.315.592
+99899 977 06 09

Расчёт энергетических уровней электронов и дырок и волновых функций в квантовой точке InAs внутри нанонити GaAs/InP/GaAs

Аннотация: В данной статье исследованы энергетические уровни электронов и дырок, а также волновые функции в наноточке InAs, встроенной в нанонить GaAs/InP/GaAs, на основе решения уравнения Шрёдингера аналитическим методом и методом конечных разностей.

При расчетах учтена непараболичность энергетических зон и использована модель Нельсона для описания зависимости эффективной массы от энергии. Результаты показали, что размер наноточки и её положение относительно стенок нанонити существенно влияют на энергетические уровни электронов и дырок. Полученные выводы имеют важное значение для разработки высокоэффективных оптоэлектронных устройств на основе нанонитей, инфракрасных лазеров, фотодетекторов, элементов квантовых компьютеров и промежуточных солнечных батарей.

Ключевые слова: полупроводниковая нанонить, квантовая точка, уравнение Шрёдингера, метод конечных разностей, энергетические уровни, волновая функция, непараболичность, оптоэлектронные устройства.

Davlatov Abror

Namangan State University Associate Professor

E-mail: litsey111213@gmail.com

Abdulazizov Bakhrom

Namangan State University Professor

O'rinboyev Doston

Namangan State Technical University PhD student

UDC: 621.315.592

+99899 977 06 09

Calculation of Electron and Hole Energy Levels and Wave Functions in an InAs Quantum Dot Embedded in a GaAs/InP/GaAs Nanowire

Abstract: This paper investigates the energy levels of electrons and holes as well as the wave functions in an InAs quantum dot embedded in a GaAs/InP/GaAs nanowire, using both analytical solutions and the finite difference method for the Schrödinger equation. The calculations take into account the nonparabolicity of the energy bands, with the effective mass energy dependence described by the Nelson model. The results demonstrate that the quantum dot size and its position relative to the nanowire boundary strongly influence the electron and hole energy levels. These findings are of significant importance for the design of high-performance nanowire-based optoelectronic devices, including infrared lasers, photodetectors, quantum computer components, and intermediate-band solar cells.

Keywords: semiconductor nanowire, quantum dot, Schrödinger equation, finite difference method, energy levels, wave function, nonparabolicity, optoelectronic devices.

Kirish

Hozirgi kunda tajriba yo'li bilan nanoiplar ichida yoki sirtida nanonnuqtalar o'stirilmoqda. [1-2] ishlarda vapor liquid-solid MOCVD method yordamida GaAs/InP nanoipi sirtida InAs kvant nuqtasi o'stirilgan va optik spektrlari o'rganilgan. [3] ishda GaAs nanoipida $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As}/\text{GaAs}$ kvant nuqtasi tuzilmalarining juda bir xil va zich to'plamini namoyish etilgan. [4] ishda InP nanoipida InAsP kvant nuqtasini o'stirilgan va fotolyumensenscion spektrlar olingan. Bu gibrid strukturalar infraqizil lazerlar, optik detektorlar, kvant kompyuterlar va quyosh batareyalari kabi yuqori samarali nanoiplarga asoslangan optoelektron qurilmalarda muhim element bo'lib xizmat qilishi mumkin. Nanoiplar ichidagi nanonnuqtali heterostrukturalar yuqori samarali bitta fotonli manbalarni ishlab chiqarish, yangi kvant-optik tajribalar, shuningdek uchinchi avlod fotovoltaiklari, kvant kompyuterlar va oraliq diapazonli quyosh batareyalarini ishlab chiqarish uchun yangi yo'l ochadi.

Nazariy qism.

Tadqiq qilinayotgan sistema $\text{InP}/\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}/\text{InP}$ geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonnuqta sistemasi bo'lib, bu yerda InP tashqi qatlam, $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ o'rta qatlam va InAs esa kvant nuqta sifatida tanlangan. Elektronlar uchun bu sistema quyidagi bir o'lchamli Shredinger tenglamasi bilan tavsiflanadi:

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left(\nabla \frac{1}{m^*(x,y,z)} \nabla \right) \psi(x,y,z) + V(x,y,z) \psi(x,y,z) = E \psi(x,y,z) \quad (1)$$

Bunda, $V(x,y,z)$ – potensial energiya, $m^*(x,y,z)$ – elektron effektiv massasi, $\psi(x,y,z)$ – elektron to'lqin funksiyasi, E – elektron energiyasi, ∇ – Nabli operatori, $\hbar$ – Plank doimiysi.

(1) tenglamani analitik hamda chekli orttirmalar usullari yordamida yechamiz, elektronlar va kovaklar energiya satxlarini aniqlaymiz.

Analitik usul. GaAs/InP/GaAs geterotuzilmali nanoipida InP ning ichidagi InAs nanonnuqtasidagi elektronlar va kovaklar energiya satxlarini aniqlaymiz. GaAs/InP/GaAs geterotuzilmali nanoipida InP ning ichidagi InAs

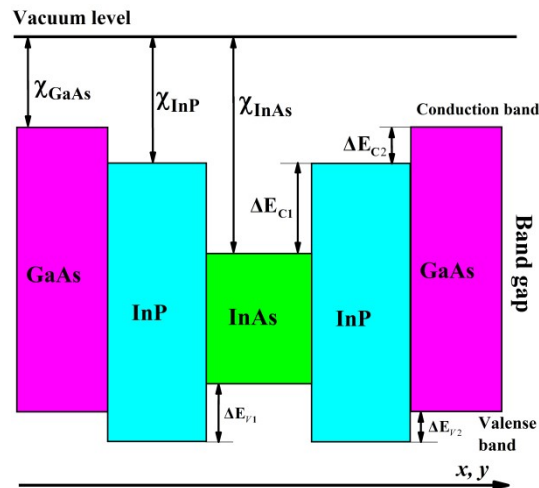
nanonuqtasida elektron va kovaklarning zona profile x va y yo'nalishlari bo'yicha 1-rasmda, z yo'nalishi bo'yicha esa 2-rasmda keltirilgan. (1) tenglamaning x va y yo'nalishlaridagi yechimlari bir xil bo'ladi va u quyidagicha qidiriladi.

$$\psi(x, y) = \begin{cases} C_{(x,y)1} e^{\chi(x,y)}, & (x, y) \in (-\infty, 0) \times (-\infty, 0) \\ C_{(x,y)2} e^{\lambda(x,y)} + C_{(x,y)3} e^{-\lambda(x,y)}, & (x, y) \in (0, a_x) \times (0, a_y) \\ C_{(x,y)4} \sin(k(x, y)) + C_{(x,y)5} \cos(k(x, y)), & (x, y) \in (a_x, b_x) \times (a_y, b_y) \\ C_{(x,y)6} e^{\lambda(x,y)} + C_{(x,y)7} e^{-\lambda(x,y)}, & (x, y) \in (b_x, c_x) \times (b_y, c_y) \\ C_{(x,y)8} e^{-\chi(x,y)}, & (x, y) \in (c_x, \infty) \times (c_y, \infty) \end{cases} \quad (2)$$

(1) tenglamaning z yo'nalishidagi yechimlari esa quyidagicha qidiriladi.

$$\psi(z) = \begin{cases} B_1 e^{\lambda(z)}, & z \in (-\infty, 0) \\ B_2 \sin(kz) + B_3 \cos(kz), & z \in (0, h) \\ B_4 e^{-\lambda(z)}, & z \in (h, \infty) \end{cases} \quad (3)$$

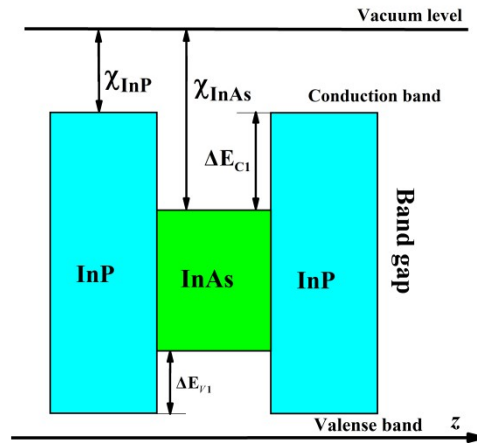
Hosil qilingan (2) va (3) tenglamalar uchun to'liq funksiyaga qo'yiladigan uzluksizlik va sinmaslik chegaraviy shartlarni qo'llaymiz hamda energiya satxlarini aniqlaymiz.



1-Rasm. GaAs/InP/InAs/InP/GaAs geterotuzilma uchun zona profili.

Chekli orttirmalar usuli. Yarimo'tkazgichli kvant o'rada, kvant ipda hamda kvant nuqtada energiya satxlarini aniqlash uchun chekli orttirmalar usulidan foydalanilgan. To'g'ri to'rtburchkli va silindrik nanoiplarda energiya

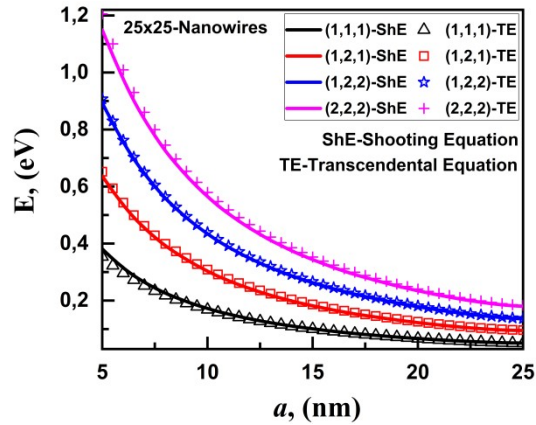
satxlari va to'liq funksiyalarini aniqlashda, effektiv massa o'zgarishini hisobga olgan holda chekli orttirmalar usulidan foydalanilgan. Yarimo'tkazgichli nanoip ichidagi nanonukta energiya satxlari va to'liq funksiyalarini aniqlashda effektiv massa o'zgarishini hisobga olgan holda Shredinger tenglamasini yechishning chekli orttirmalar usulidan foydalanganimizda quyidagi tenglama kelib chiqadi.



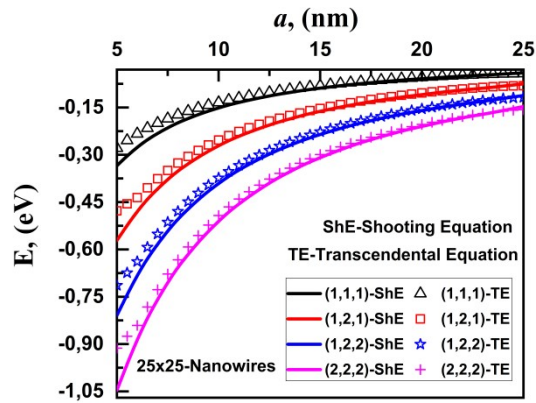
2-Rasm. InP/InAs/InP geterotuzilma uchun zona profili.

$$\begin{aligned} & \frac{m_{i,j,k} + m_{i-1,j,k}}{m_{i,j,k} + m_{i+1,j,k}} \psi_{i+1,j,k} + \frac{m_{i,j,k} + m_{i,j-1,k}}{m_{i,j,k} + m_{i,j+1,k}} \psi_{i,j+1,k} + \frac{m_{i,j,k} + m_{i,j,k-1}}{m_{i,j,k} + m_{i,j,k+1}} \psi_{i,j,k+1} \\ & - (m_{i,j,k} + m_{i-1,j,k}) \frac{\delta x^2}{\hbar^2} (V_i - E) \psi_{i,j,k} - (m_{i,j,k} + m_{i,j-1,k}) \frac{\delta y^2}{\hbar^2} (V_j - E) \psi_{i,j,k} - (m_{i,j,k} + m_{i,j,k-1}) \frac{\delta z^2}{\hbar^2} (V_k - E) \psi_{i,j,k} \\ & + \psi_{i-1,j,k} + \psi_{i,j-1,k} + \psi_{i,j,k-1} - 6 \psi_{i,j,k} = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Hosil qilingan (4) tenglamadan foydalanib energiya satxlari aniqlaymiz.



3-rasm. To'g'ri to'rtburchakli o'chamlari 25x25 nm bo'lgan GaAs/InP/GaAs geterotuzilmali nanoipida InP ning ichidagi InAs kubik nanonuatidagi elektronlar energiya satxlarini nanonuat qirradi o'lchamiga bog'liqligi.



4-rasm. To'g'ri to'rtburchakli o'chamlari 25x25 nm bo'lgan GaAs/InP/GaAs geterotuzilmali nanoipida InP ning ichidagi InAs kubik nanonuatidagi yengil kovaklarning energiya satxlarini nanonuat qirradi o'lchamiga bog'liqligi

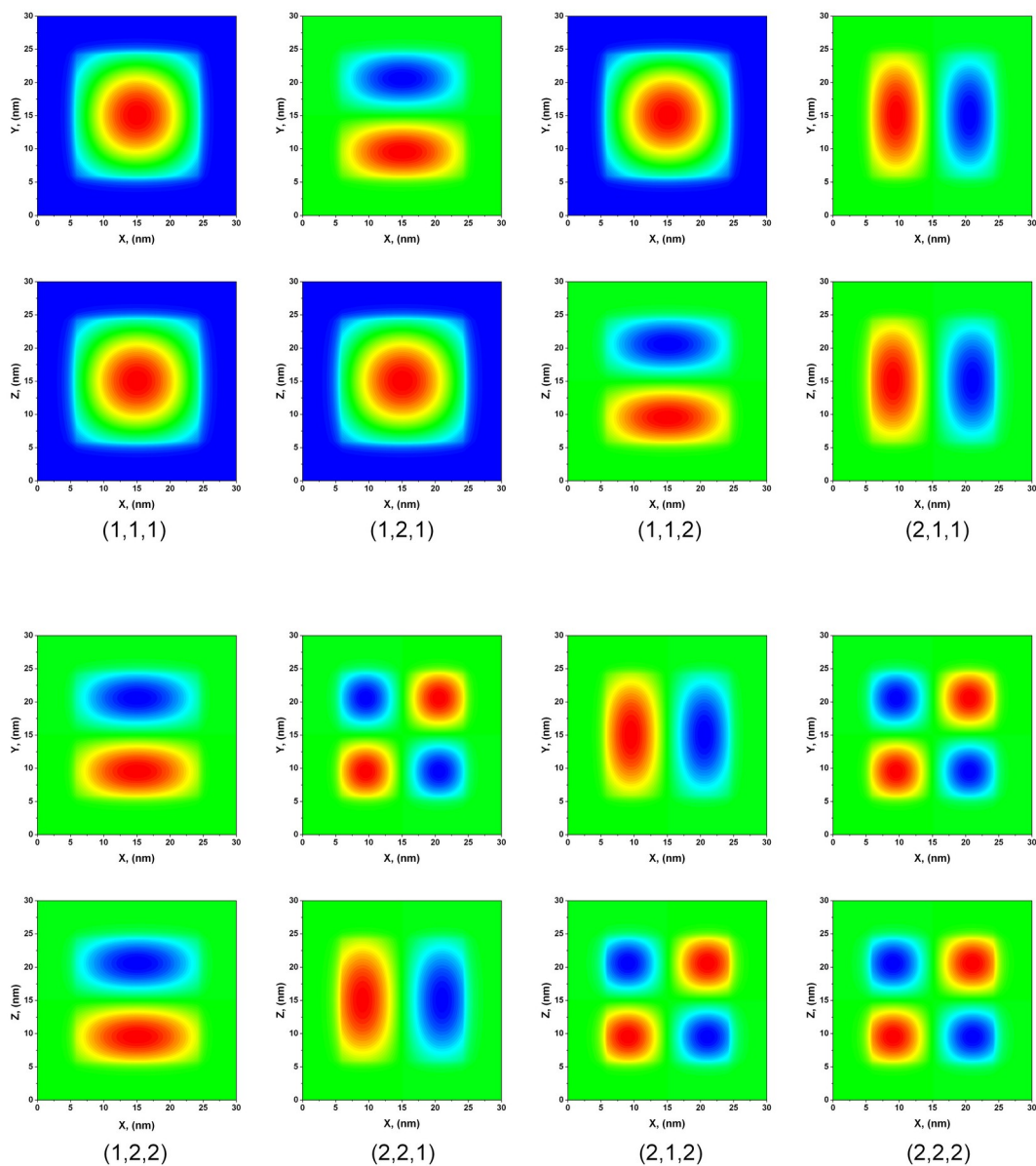
Natijalar va muloxazalar.

Ko'plab yarimo'tkazgichli birikmalarda o'tkazuvchanlik va valent zonalari zaryad tashuvchilar energiyasi uchun noparabolik dispersiya qonuniga ega bo'ladi. Zonaning noparabolikligini hisobga olish uchun Keyn nazariyasidan [7] foydalaniladi. A_3B_5 birikmali potensial o'ra uchun o'tkazuvchanlik zonasini noparabolikligini hisobga olgan holda, energiya satxlarini hisoblashni sodda variantlari keltirilgan [8]. [9-10] ishlarda effektiv massa uchun turli xil taqribiyliklar keltirilgan. Biz elektronlar va kovaklarning effektiv massalarini

energiyaga bog'liqligi uchun Nelson modelidan foydalanamiz [10]. Nelson modeli noparaboliklik effektini ifodalashda effektiv massalarning energiyaga bog'liqligi uchun juda qulay va sodda hisoblanadi. Yuqorida keltirilgan (2), (3), va (4) tenglamalarda kiritilgan parametrlarni 1-2-rasmlardan va [6] ishda keltirilgan GaAs, InP va InAs moddalar zonaviy parametrlaridan foydalanib ifodalab olamiz. 3-4-rasmlarda o'lchamlari 25×25 nm bo'lgan nanoip ichidagi kubik nanonuqtaning qirrasi 5 dan 25 nm gacha o'zgarganda elektron va yengil kovaklarning birinchi to'rtta satx energiyalarining o'zgarishi tasvirlangan. Yuqorida keltirilgan analitik yechim va chekli orttirmalar usuli (4) beradigan yechimlar bir-biriga yaqin natijalar berishini ko'rishimiz mumkin. Nanonuqta qirrasi kichik bo'lganda chekli orttirmalar usuli beradigan natijalar 1 % xatolik bilan, nanonuqta qirrasi katta bo'lganda esa 0,1 % xatolik bilan natija berar ekan.

8-rasmda kubik shakldagi $18 \times 18 \times 18$ nm InAs nanonuqta 20×20 nm kesimli GaAs/InP/GaAs nanoip ichiga joylashtirilgan holatda, elektronning kvant holatlariga mos to'liq funksiyasining fazoviy taqsimoti ikki proeksiyada: xy va zx tekisliklarda tasvirlangan. Bu tasvirlar elektronning ehtimollik zichligining makonda qanday taqsimlanganini vizual ko'rsatib beradi. Grafikdan ko'rinib turibdiki, to'liq funksiyaning eng yuqori intensivlik sohasi (ya'ni maksimal ehtimollik zichligi) nanonuqtaning markaziy hududiga to'g'ri keladi. Bu holat kvant qamrov effektining kuchli ekanligini bildiradi: elektron kuchli potensial to'siqlar bilan o'ralgan va u markazda lokalizatsiyalangan. To'liq funksiyaning simmetrik taqsimoti esa strukturadagi geometrik simmetriyaga mos keladi. xy tekisligidagi proeksiya nanonuqtaning transversal (yonlama) yo'nalishlaridagi zichlik taqsimotini aks ettiradi. Bunda to'liq funksiyasi xam xxx, ham yyy yo'nalishlar bo'yicha simmetrik bo'lib, markazda maksimal, cheklarda esa nolga intiladi. Bu to'liq funksiyaning chegaraviy shartlarga mosligini bildiradi, ya'ni struktura chegaralarida $\psi \rightarrow 0$. zx tekisligidagi proeksiya esa elektronning vertikal

(uzunlamasiga) yo‘nalishdagi fazoviy taqsimotini ko‘rsatadi. Bu yo‘nalishda ham simmetrik zichlik profili kuzatiladi.



5-rasm. $20 \times 20 \text{ nm}$ o‘lchamli GaAs/ InP/GaAs geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan $18 \times 18 \times 18 \text{ nm}$ o‘lchamli InAs nanonnuqtadagi elektronning to‘lqin funksiyasi xy va zx tekisliklaridagi proeksiyalari.

Elektronning to‘lqin funksiyasi z yo‘nalishida ham maksimal ehtimollik bilan markaziy hududda joylashgan. Bu rasm, ayniqsa, elektronning InAs nanonnuqta ichida to‘liq lokalizatsiyalanganini tasdiqlaydi. Mazkur to‘lqin funksiyalarining strukturaviy proeksiyalari nafaqat kvant mexanik

modellashtirish uchun muhim, balki ular optik o'tish ehtimollari, fotoionizatsiya jarayonlari, dipol momentlari va boshqa optoelektron xossalarning miqdoriy hisob-kitoblarida asosiy rol o'ynaydi. Ayniqsa, to'lqin funksiyaning fazoviy shakli va simmetriyasi o'rtasida kuchli bog'liqlik mavjud bo'lib, bu foton yutilish va emissiya jarayonlarini boshqarishda qo'llaniladi. Xulosa qilib aytganda, 8-rasmdagi xy va zx proeksiyalar to'lqin funksiyaning simmetrik, lokalizatsiyalangan va klassik kvant qamrov zonasiga mos fazoviy xatti-harakatini ko'rsatadi. Bu esa, mazkur strukturada elektron holatlarining barqaror va silliq shakllanishini, ya'ni kvantlashtirish mexanizmining mukammalligini anglatadi. Ushbu natijalar nanooptik va kvant qurilmalarda holatlar zichligi va optik selektivlikni nazorat qilishda muhim rol o'ynaydi.

Xulosa.

Yarimo'tkazgichli nanoip ichidagi kubik nanonuatdagi elektronlar va yengil kovaklarning birinchi to'rtta satx energiyalari Shredinger tenglamasini analitik va chekli orttirmalar usuli yordamida yechish orqali dispersiyaning noparabolikligini hisobga olgan holda aniqlandi.

Nanonuqta nanoip devoriga yaqin joylashganda satxlarga to'g'ri keluvchi energiyalar kattaroq qiymatlarda bo'lishini va nanonuqta nanoip o'rtalarida ko'chirilganda esa deyarli satxlariga to'g'ri keluvchi energiyalar o'zgarmas bo'lishi keltirilgan.

Agar yarimo'tkazgichli nanoipning qirrasi o'lchami nanonuqta qirrasi o'lchamiga yaqin bo'lganda energiya satxlariga mos keluvchi energiya qiymatlari kattaroq, nanoip qirrasi o'lchamini orttirib borganimizda nanonuqtadagi energiya satxlari kamayib borishi, nanoip qirrasining o'lchami nanonuqta qirrasi o'lchamiga nisbatan kattaroq qiymatlarida energiya satxlariga to'g'ri keluvchi energiyalar deyarli o'zgarmas ekanligi ko'rsatildi.

Adabiyotlar.

1. Yan, X., Tang, F., Wu, Y., Li, B., Zhang, X., & Ren, X. (2017). Growth of isolated InAs quantum dots on core-shell GaAs/InP nanowire sidewalls by MOCVD. *Journal of Crystal Growth*, 468, 185–187. doi:10.1016/j.jcrysgr.2016.11.085.
2. Yan, X., Zhang, X., Li, J., Cui, J., & Ren, X. (2015). Fabrication and optical properties of multishell InAs quantum dots on GaAs nanowires. *Journal of Applied Physics*, 117(5), 054301. doi:10.1063/1.4906966.
3. Tatebayashi, J.; Ota, Y.; Ishida, S.; Nishioka, M.; Iwamoto, S.; Arakawa, Y. (2014). Highly uniform, multi-stacked InGaAs/GaAs quantum dots embedded in a GaAs nanowire. *Applied Physics Letters*, 105(10), 103104. doi:10.1063/1.4895597
4. Zhong, Z., Li, X., Wu, J., Li, C., Xie, R. B., Yuan, X., ... Jagadish, C. (2019). Wavelength-tunable InAsP quantum dots in InP nanowires. *Applied Physics Letters*, 115(5), 053101. doi:10.1063/1.5095675.
5. P. Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, 4th Edition. 624 Pages. 2005 John Wiley.
6. G. Gulyamov, A. G. Gulyamov, A. B. Davlatov, and Kh. N. Juraev. Energy Levels in Nanowires and Nanorods with a Finite Potential Well. *Advances in Condensed Matter Physics*. Volume 2020, Article ID 4945080, 12 pages. <https://doi.org/10.1155/2020/4945080>.
7. E. Kane. Band structure of indium antimonide. *J. Phys. Chem. Solids*. **1**, 249 (1957); doi: 10.1016/0022-3697(57)90013-6.
8. U. Ekenberg. (1989). Nonparabolicity effects in a quantum well: Sublevel shift, parallel mass, and Landau levels. *Physical Review B*, 40(11), 7714–7726. doi:10.1103/physrevb.40.7714.
9. A. Godoy, Z. Yang, U. Ravaioli, F. Gámiz. Effects of nonparabolic bands in quantum wires. *J. Appl. Phys.* **98**, 013702 (2005); doi: 10.1063/1.1940143.

10. D.F. Nelson, R.C. Miller, D.A. Kleinman. Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells. Physical Review B, 35(14), (1987), 7770–7773. doi:10.1103/PhysRevB.35.7770.

11. Sadao Adachi. // GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications // Journal of Applied Physics, (1985). 58(3), R1-R29 (1985). [doi:10.1063/1.336070](https://doi.org/10.1063/1.336070).

12. Haug, H. & Koch, S. W. Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors (World Scientific, 2009) <https://doi.org/10.1142/7184>.