NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI, [2026-10]
ISSN:2181-1458
ISSN:2181-0427

01.00.00-FIZIKA-MATEMATIKA
journal.namdu.uz
PHYSICS AND MATHEMATICS

UO'T: 621.315.592

NANOIP ICHIDAGI NANONUQTANING ENERGETIK SATHINI NANOIP O'LCHAMI VA NANONUQTA KOORDINATASIGA BOG'LIQLIGI

O'rinboyev Dostonbek
Namangan davlat pedagogika instituti, PhD
E-mail: dostonbek0408@gmail.com

Annotatsiya: *Maqolada asosi to'g'ri to'rtburchak shaklidagi yarimo'tkazgich nanoiplar ichida joylashgan nanonuqtalarda elektronlarning energiya sathlari va to'lqin funksiyalarini nazariy tadqiq etishga bag'ishlangan. Kvant cheklanish sharoitida Schredinger tenglamasini yechish orqali diskret energiya spektri aniqlanib, nanostrukturaning geometrik va material parametrlarining elektron xossalarga ta'siri tahlil qilindi. Nanonuqta o'lchami va joylashuvining energiya sathlariga ta'siri ko'rsatilib, elektron to'lqin funksiyalarining fazoviy lokalizatsiyasi o'rganildi.*

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

ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ВНУТРИ НАНОПРОВОЛОКИ ОТ РАЗМЕРОВ НАНОПРОВОЛОКИ И КООРДИНАТ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Аннотация: *В Статья посвящена теоретическому исследованию энергетических уровней и волновых функций электронов в квантовых точках, расположенных внутри полупроводниковых нанопроволок с прямоугольным поперечным сечением. Путём решения уравнения Шрёдингера в условиях квантового ограничения определён дискретный энергетический спектр, а также проанализировано влияние геометрических и материальных параметров наноструктуры на электронные свойства. Исследовано влияние размера и положения квантовой точки на энергетические уровни, а также изучена пространственная локализация электронных волновых функций.*

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

DEPENDENCE OF THE ENERGY LEVELS OF A QUANTUM DOT INSIDE A NANOWIRE ON THE NANOWIRE DIMENSIONS AND THE COORDINATES OF THE QUANTUM DOT

Abstract: *The article is devoted to the theoretical investigation of the energy levels and wave functions of electrons in quantum dots embedded in semiconductor nanowires with a rectangular cross-section. By solving the Schrödinger equation under quantum confinement conditions, the discrete energy spectrum was determined, and the effects of the geometrical and material parameters of the nanostructure on the electronic properties were analyzed. The influence of the quantum dot size and position on the energy levels was investigated, and the spatial localization of the electron wave functions was studied.*

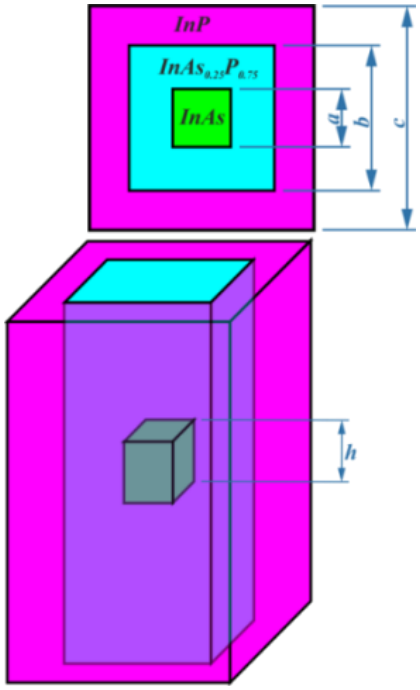
Keywords: *semiconductor nanowire, quantum dot, Schrödinger equation, finite difference method, energy levels, wave function, nonparabolicity, optoelectronic devices.*

KIRISH

So'nggi yillarda nanoiplar tarkibidagi kvant nuqtalarning energetik va optik xususiyatlarini tadqiq etish nanoelektronika va nanofotonikaning dolzarb yo'nalishlaridan biriga aylandi. Reznik va hammualliflari [1] nanoip geometriyasi kvant nuqtalardan chiqayotgan nurlanish yo'nalishiga sezilarli ta'sir qilishini ko'rsatgan. Dalacu va hammualliflari [2] InP nanoiplardagi InAsP kvant nuqtalarining optik xususiyatlari nanoip geometriyasi va kristall tuzilishiga bog'liqligini aniqlagan. Renard va hammualliflari [3] esa kvant nuqta o'lchami va atrof-muhitining optik o'tishlarga ta'sirini tadqiq qilgan.Tadqiq qilinayotgan sistema InP/$InAs_{0.25}P_{0.75}$/InP geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonuqta sistemasi bo'lib, bu yerda InP tashqi qatlam, $InAs_{0.25}P_{0.75}$ o'rta qatlam va InAs esa kvant nuqta sifatida tanlangan. Bu sistemaning geometrik tuzilishi 1-rasmda keltirilgan. Elektronlar uchun bu sistema quyidagi uch 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-rasm. InP/InAs0.25P0.75/InP geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonuqta sistemasi uchun geometrik sxema.

1-rasmda InP/InAs0.25P0.75/InP geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonuqta sistemasi uchun geometrik sxema keltirilgan. Bu turdagi murakkab uch komponentli geterotuzilma – nanooptik va nanoelektron qurilmalar uchun istiqbolli kvant tizimlardan biridir. InAs nanonuqta (yashil kub): Markaziy qismda joylashgan bu kubik kvant nuqta yarimo‘tkazgich ichidagi zarralar uchun kuchli kvant cheklanishini hosil qiladi. Ushbu nanonuqta kub shaklida bo‘lib, uning o‘lchami ***a*** bilan belgilanadi. Kvant nuqta ichida energiya sathlari diskret qiymatga ega bo‘lib, elektr va optik xususiyatlarga sezilarli darajada ta’sir ko‘rsatadi. InAs0.25P0.75 nanoip yadrosi (ko‘k qatlam): InAs nanonuqtani o‘rab turgan soha yarimo‘tkazgichli aralash qotishmadan tashkil topgan bo‘lib, InAs nanonuqtani o‘rab turgan soha yarimo‘tkazgichli aralash qotishmadan tashkil topgan bo‘lib, bu sohada materialning effektiv potensiali,panjara doimiysi va effektiv massasi InAs va InP komponentlari nisbatiga bog‘liq ravishda o‘zgaradi. Uning o‘lchami b bilan belgilanadi. InP tashqi qobig‘i (pushti tashqi qatlam): Butun struktura InP materialidan tashkil topgan qattiq qobiq bilan o‘ralgan. InP materialining taqiqlangan zonasi keng energiyali bo‘lganligi (band gap) sababli, elektronlar va kovaklar InAs yoki InAsP sohada to‘planadi va InP qatlam orqali potensial to‘siq hosil bo‘ladi. Tashqi qobiqning umumiy o‘lchami c bilan ifodalanadi. Shuni ta’kidlash kerakki, bu turdagi strukturalar ichida panjaraviy mos kelmaslik mavjud bo‘lib, u elastik deformatsiyalarni keltirib chiqaradi. Bu esa o‘z navbatida valent zonasi va o‘tkazuvchanlik zonasi chegaralarining egilishi, effektiv massalarning o‘zgarishi hamda elektron kovak juftliklarining qayta taqsimlanishiga olib keladi. Bundan tashqari, haroratning o‘zgarishi yoki tashqi bosim ta’siri ostida bu struktura sezilarli termodinamik yoki optik o‘zgarishlarni ko‘rsatadi.

Potensial energiya quyidagicha ifodalanadi:

$$V(x,y)=\begin{cases}V_1, & (x,y)\in(-\infty,0)\times(-\infty,0)\cup(c_x,\infty)\times(c_y,\infty)\\ V_2, & (x,y)\in(0,a_x)\times(0,a_y)\cup(b_x,c_x)\times(b_y,c_y)\\ 0, & (x,y)\in(a_x,b_x)\times(a_y,b_y)\end{cases} \quad (2)$$

$$V(z)=\begin{cases}V_2 & z\in(-\infty,0)\cup(h,\infty)\\ 0 & z\in(0,h)\end{cases} \quad (3)$$

bunda, InAs0.25P0.75 va InAs na’munalarning potensial to‘siqlari farqi, InP va InAs na’munalarning potensial to‘siqlari farqi, InAs nanonuqtaning o‘qlari bo‘yicha o‘lchamlari, InAs0.25P0.75 nanoipning o‘qlari bo‘yicha o‘lchamlari, InP tashqi nanoqatlamning o‘lchamlari. nanoniqtaning o‘qlari bo‘yicha o‘lchamlari.$V_2-V_1-a_x,a_y,h-x,y,z-b_x,b_y-x,y-c_x,c_y-\ a_x,a_y-x,y-$

Effektiv massa quyidagicha ifodalanadi:

$$m(x,y)=\begin{cases} m_1, & (x,y)\in(-\infty,0)\times(-\infty,0)\cup(c_x,\infty)\times(c_y,\infty) \\ m_2, & (x,y)\in(0,a_x)\times(0,a_y)\cup(b_x,c_x)\times(b_y,c_y) \\ m_0, & (x,y)\in(a_x,b_x)\times(a_y,b_y) \end{cases} \quad (4)$$

$$m(z)=\begin{cases} m_2 & z\in(-\infty,0)\cup(h,\infty) \\ m_0 & z\in(0,h) \end{cases} \quad (5)$$

Potensial to‘siq va o‘ra chegarasida to‘lqin funksiya uzluksiz ekanligidan:

$$\psi_i(x_j)\big|_{a_i}=\psi_{i+1}(x_{j+1})\big|_{a_{i+1}} \quad \frac{1}{m_i^*}\frac{\partial\psi_i(x_j)}{\partial x_j}\bigg|_{a_i}=\frac{1}{m_{i+1}^*}\frac{\partial\psi_{i+1}(x_{j+1})}{\partial x_{j+1}}\bigg|_{a_{i+1}}$$

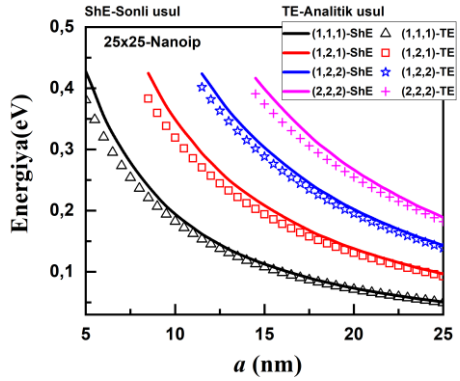
hamda to‘lqin funksiya normallanishidan foydalaniladi. Potensial to‘siq va o‘ra chegarasini to‘lqin funksiya uzluksiz ekanligidan hamda to‘lqin funksiya normallanishidan foydalaniladi. Energiya sathlari quyidagi transcendent tenglamadan foydalanib aniqlanadi:

$$\begin{aligned} &2(\alpha^2\chi^2-\lambda^2)(\beta^2\lambda^2+k^2)\cosh\big(\lambda(a+b-c)\big)\sin\big(k(a-b)\big) \\ &-(\alpha\chi-\lambda)^2e^{\lambda(b-a-c)}\Big((\beta^2\lambda^2-k^2)\sin\big(k(b-a)\big)-2\beta k\lambda\cos\big(k(b-a)\big)\Big) \\ &-(\alpha\chi+\lambda)^2e^{\lambda(a+c-b)}\Big((\beta^2\lambda^2-k^2)\sin\big(k(b-a)\big)+2\beta k\lambda\cos\big(k(b-a)\big)\Big)=0 \quad (6) \end{aligned}$$

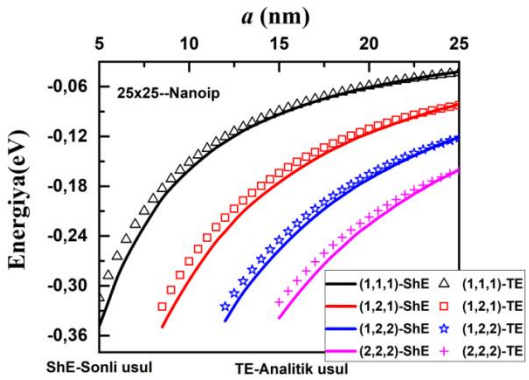
Chekli orttirmalar usuli. Kvazizarraviy tuzilmalar, ya’ni kvant o‘ra, kvant ip va kvant nuqtalardagi energetik sathlarni aniqlash uchun chekli orttirmalar usuli (finite difference method) qo‘llanilgan. Ushbu usul kvant mexanikaviy tizimlardagi Schredinger tenglamasini raqamli yechishda samarali bo‘lib, energetik sathlarni topish imkonini beradi. Bunday holatda chekli orttirmalar usuli quyidagi differensial tenglamalarning diskretlashgan ko‘rinishiga olib keladi:

$$\begin{aligned} &\frac{m_{i,j,k}+m_{i-1,j,k}}{m_{i,j,k}+m_{i+1,j,k}}\psi_{i+1,j,k}+\frac{m_{i,j,k}+m_{i,j-1,k}}{m_{i,j,k}+m_{i,j+1,k}}\psi_{i,j+1,k}+\frac{m_{i,j,k}+m_{i,j,k-1}}{m_{i,j,k}+m_{i,j,k+1}}\psi_{i,j,k+1} \\ &-\big(m_{i,j,k}+m_{i-1,j,k}\big)\frac{\delta x^2}{\hbar^2}(V_i-E)\psi_{i,j,k}-\big(m_{i,j,k}+m_{i,j-1,k}\big)\frac{\delta y^2}{\hbar^2}(V_j-E)\psi_{i,j,k} \\ &-\big(m_{i,j,k}+m_{i,j,k-1}\big)\frac{\delta z^2}{\hbar^2}(V_k-E)\psi_{i,j,k} \\ &+\psi_{i-1,j,k}+\psi_{i,j-1,k}+\psi_{i,j,k-1}-6\psi_{i,j,k}=0 \quad (7) \end{aligned}$$

(7)-tenglamani yechishda, fizikaviy modelning fazoviy chegaralarida kvant zarrachaning to‘lqin funksiyasi va uning xossalari haqidagi talablarga asoslanib, muayyan chegaraviy shartlar qo‘llaniladi. Ushbu cheklangan fazoviy yondashuvda energiya sathlarini hisoblashda yuzaga keluvchi xatolik cheksiz chegarali yechimga nisbatan atigi ni tashkil etadi, ya’ni hisoblash aniqligi juda yuqori darajada ta’minlanadi. $0.001\ meV$



2-rasm. geterotuzilmali kesimli nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi nanonuqtadagi elektronlarning energetik sathlarini o‘lchamiga bog‘liqligi.$InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP25\times25\ nmInAs$



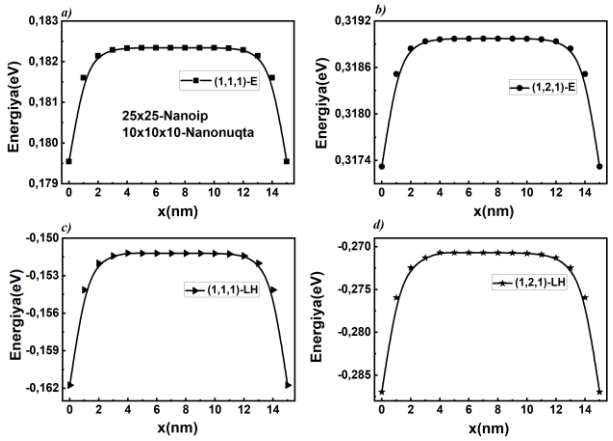
3-rasm. geterotuzilmali kesimli nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonuqtadagi yengil kovak (lighthole)larning energiya sathlarining o‘lchamiga bog‘liqligi.$InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP25\times25\ nm$

2 va 3-rasmda geterotuzilmali kesimli nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonuqtaning o‘lchami o‘zgarganda elektronlar va kovaklarning dastlabki to‘rt energetik sathlarining qiymatlaridagi o‘zgarish tasvirlangan.

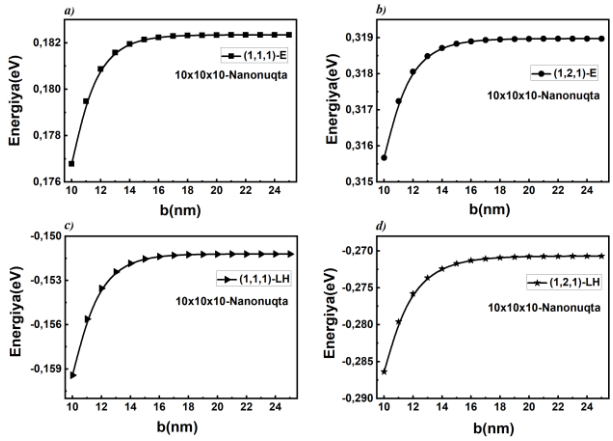
Kvant mexanikasiga koʻra, zarraning fazoviy harakati cheklanganda, ya’ni u tor hududda joylashganda, energiya sathlari diskret (uzlukli) tus oladi va oʻlcham kichiklashgan sari energiya sathlari yuqoriga siljiydi. Rasmda aynan shu hodisa kuzatiladi: nanonuqta oʻlchami dan gacha oshirilganda, elektronlarning asosiy (), birinchi eksitlangan (), () va () holatlarga mos energiya sathlari bosqichma-bosqich kamayib boradi. Bu grafikdan koʻrinadiki, energiya sathlarining kamayishi chiziqli emas-boshlangʻich bosqichda (oraligʻida) energiya oʻzgarishi ancha keskin, lekin oʻlcham oraligʻiga yetganda oʻzgarish nisbatan sustlashadi.$\mathrm{InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP25 \times 25\ nm5\ nm25\ nm1,1,11,2,12,1,12,2,15-15\ nm20-25\ nm}$

Bu holat kvant sistemaning oʻlchamga nisbatan sezgirligini anglatadi va shundan kelib chiqib, oʻlchamlarni nozik boshqarish orqali kerakli optoelektron xossalarga ega boʻlgan nanotuzilma yaratish mumkinligini koʻrsatadi. Shuningdek, bu rasmda koʻrsatilgan energiya sathlari analitik metod va chekli orttirmalar usuli orqali hisoblab chiqilgan. Har ikkala usulda olingan natijalar bir-biriga yaqin boʻlib, bu usullarning ishonchliligi va modellashtirishning dolzarbligini tasdiqlaydi. Shu bilan birga, hisob-kitoblar elektronlarning samarali massasining energiyaga bogʻliqligini hisobga olgan holda (Nelson-Kane modeli asosida) bajarilgan, bu esa past energiyali sathlar uchun yuqori aniqlikda natijalar olish imkonini beradi. Mazkur rasm fundamental fizika qonuniyatlarini amaliy nanostruktura dizayni bilan bogʻlaydi va nanonuqta oʻlchamining nazorat qilinishi orqali energiya spektrini sozlash mumkinligini koʻrsatadi.

4-rasmda geterotuzilmali toʻgʻri toʻrtburchak kesimli nanoip ichida joylashgan kubik shakldagi InAs nanonuqta nanoip ichida joylashuvining oʻzgarishiga qarab elektron va yengil kovaklarning (lightholes) dastlabki energetik sathlarining qanday oʻzgarishi kuzatilgan. Bu koordinataga bogʻliq energiya sathlari, nanonuqtaning pozitsiyasini oʻzgartirish orqali kvant holatlar qanday ta’sirlanishini aniqlash imkonini beradi. Rasmda koʻrsatilganidek, nanonuqta nanoipning markaziy qismida joylashganda (ya’ni) elektron va kovaklar uchun sathlar barqaror holatda boʻladi — bu markaziy pozitsiya tufayli kvant qamrov simmetrik boʻladi va toʻlqin funksiyalar struktura markaziga yoʻnaltirilgan boʻladi. Ammo nanonuqta nanoip chekkalariga qarab siljiganda, toʻlqin funksiyalar va sathlar ushbu geometrik oʻzgarishdan ta’sirlanadi: elektronlar () sathi dan gacha, () sathi esa dan gacha oshadi. Bu kichik oʻzgarishlar kvant qamrov sharoitlarining buzilishi bilan bogʻliq boʻlib, nanonuqtaning chegaralarga yaqinlashganida potensial profilning asimmetriklashuvi natijasidir. Kovaklar uchun esa oʻzgarishlar manfiy energiya qiymatlari bilan ifodalanadi, chunki ular valentlik zonasiga tegishli. () holat uchun kovak energiyasi dan gacha, () sath esa dan gacha siljiydi. Bu energiyaviy koʻtarilish kovak toʻlqin funksiyalarining nanoip chegaralari yaqinida kuchliroq kvantlashuvga uchrashi bilan bogʻliq.$\mathrm{InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP}x = 0, y = 01,1,10.1795\ eV0.1825\ eV1,2,10.3172\ eV0.319\ eV1,1,1 - 0.162\ eV - 0.151\ eV1,2,1 - 0.288\ eV - 0.271\ eV$



4-rasm. 25×25 nm oʻlchamli geterotuzilmali toʻgʻri toʻrtburchak kesimli nanoip ichida joylashgan oʻlchamli kubik nanonuqtadagi elektron va yengil kovaklarning energiya sathlarining koordinataga bogʻliqligi.$\mathrm{InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP10 \times 10 \times 10\ nmInAs}$



5-rasm. geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan oʻlchamli kubik nanonuqtadagi elektron va yengil kovaklarning energiya sathlarining nanoip oʻlchami ga bogʻliqligi.$\mathrm{InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP10 \times 10 \times 10\ nmInAs}\mathbf{b \times b}$

5-rasmda geterotuzilmali nanoip ichida joylashgan oʻlchamli kubik nanonuqtadagi elektron va yengil kovaklarning energiya sathlarining nanoip oʻlchami ga bogʻliqligi tasvirlangan. Grafikda dan gacha oʻzgartirilgan. Ushbu rasm orqali kvant qamrov darajasining faqat nanonuqtaning oʻz oʻlchamiga emas, balki uni oʻrab turgan nanoipning geometriyasiga ham kuchli bogʻliqligi ochiq koʻrsatilgan. Transversal oʻlchamlar kichik boʻlganda (masalan,), nanoipdagi kvantlashuv

effekti kuchsiz bo‘lib, energiya sathlari pastroq qiymatlarda joylashadi. Bunda elektron () sathi va kovak () sathi atrofida joylashgan. Nanoip o‘lchami oshib borganda, ya’ni ga yetganda, strukturadagi qamrov kuchlilashadi, ya’ni elektronlar va kovaklar uchun fazoviy cheklovlar oshib ketadi. Natijada energetik sathlar yuqoriga siljiydi: elektron energiyasi, kovakniki esa ga tushadi. Bu energiya siljishi shuni anglatadiki, nanoip qanchalik tor bo‘lsa, energiya sathlari pastroq, ya’ni kuchliroq kvantlashuv mavjud bo‘ladi. Shuningdek, yuqoriroq sathlar (masalan, ()) ham sezilarli darajada o‘zgaradi: elektronlar uchun dan gacha, kovaklar uchun dan gacha siljiydi. Bu tendensiya sathlararo farqning ham o‘lchamga bog‘liqligini bildiradi, ya’ni o‘lchamni nazorat qilish orqali optik o‘tish energiyalarini sozlash mumkin.$\mathrm{InP/InAs_{0.25}P_{0.75}/InP10 \times 10 \times 10\ nmInAs}\mathbf{b} \times \mathbf{b}b = 10\ nmb = 25\ nmb = 10\ nm1{,}1{,}1 \approx 0.177\ eV1{,}1{,}1 \approx -0.159\ eVb = 25\ nm \approx 0.182\ eV \approx -0.151\ eV1{,}2{,}10.3155\ eV0.319\ eV - 0.288\ eV - 0.271\ eV$

XULOSA

Tadqiqotda InAs nanonuqtadagi elektron va yengil kovaklarning energetik sathlarining nanonuqta o‘lchami, joylashuvi va nanoip o‘lchamiga bog‘liqligi aniqlandi. Nanonuqta o‘lchami va nanoip geometriyasining o‘zgarishi energetik sathlarning siljishiga olib kelishi, nanonuqtaning markaziy joylashuvi esa energetik sathlarning barqarorligini ta’minlashi ko‘rsatildi. Analitik va chekli orttirmalar usullarining yaqin natijalari hisoblashlarning ishonchliligini tasdiqladi. Olingan natijalar nanoip va nanonuqta geometrik parametrlarini boshqarish orqali energetik spektr hamda optoelektron xususiyatlarni sozlash imkonini ko‘rsatadi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. R.R. Reznik, K.M. Morozov, I.L. Krestnikov, K.P. Kotlyar, I.P. Soshnikov, L. Leandro, N. Akopian, G.E. Cirlin, Directional radiation from GaAs quantum dots in AlGaAs nanowires. Tech. Phys. Lett. 47(5), 405–408 (2021). https://doi.org/10.1134/S106378502104026X

2. D. Dalacu, K. Mnaymneh, J. Lapointe, X. Wu, P.J. Poole, G. Bulgarini, V. Zwiller, M.E. Reimer, Ultraclean emission from InAsP quantum dots in defect-free wurtzite InP nanowires. Nano Lett. 12(11), 5919–5923 (2012). https://doi.org/10.1021/nl303327h

3. J. Renard, R. Songmuang, C. Bougerol, B. Daudin, B. Gayral, Exciton and biexciton luminescence from single GaN/AlN quantum dots in nanowires. Nano Lett. 8(7), 2092–2096 (2008). https://doi.org/10.1021/nl0800873