

GRAFENDAGI SOCHUVCHI MARKAZLARNING TO'LQIN PAKETI DINAMIKASIGA TA'SIRINI NAZARIY O'RGANISH

G. Milibaeva^{1,*}, A. Rahimov², J.R. Nurmetov³, K. Bobojonov³, A. Uzoqov^{1,4}, H. Raximov¹

¹ O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi Materialshunoslik Instituti, Toshkent sh.

² Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy universiteti, Toshkent sh.

³ Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti, Urganch sh., Xorazm

⁴ Nizomiy nomidagi O'zbekiston milliy pedagogika universiteti, Toshkent sh.

* e-mail: gmilibaeva@gmail.com

Abstrakt. Ushbu ishda grafen monoqatlamida chiziqli joylashgan doirasimon elektrostatik sochuvchi markazlar mavjud bo'lganda to'lqin paketi dinamikasi nazariy jihatdan o'rganildi. Tadqiqotning asosiy maqsadi sochuvchi markazlar yaqinlashtirilganda ularning potensial sohalari ustma-ust qoplanishi natijasida to'lqin paketining potensial hududdan o'tish ehtimolligi qanday o'zgarishini aniqlashdan iborat. Hisoblashlar Dirak uzluksiz modeli va operatorlarni ajratish usuli yordamida bajarildi. Natijalar sochuvchi markazlar sonining ortishi bilan to'lqin paketining to'siqdan o'tish ehtimolligi kamayishini, potensial baryerning yuqori qiymatlarida esa bu ta'sir yanada ortishi ko'rsatadi.

Kalit so'zlar: grafen, to'lqin paketi, elektrostatik potensial, potensial to'siq, Dirak tenglamasi.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАССЕЙВАЮЩИХ ЦЕНТРОВ В ГРАФЕНЕ НА ДИНАМИКУ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

Аннотация. В данной работе теоретически исследуется динамика электронного волнового пакета в монослое графена при наличии линейно расположенных круговых электростатических рассеивающих центров. Основной целью исследования является выяснение того, как изменяется вероятность прохождения волнового пакета через потенциальную область при сближении рассеивающих центров, когда их потенциальные области частично или полностью перекрываются. Расчёты выполнены в рамках непрерывной модели Дирака с использованием метода разделения операторов. Полученные результаты показывают, что с увеличением числа рассеивающих центров вероятность прохождения волнового пакета через потенциальный барьер уменьшается, причём при более высоких значениях потенциального барьера данный эффект проявляется более выражено.

Ключевые слова: графен, волновой пакет, электростатический потенциал, потенциальный барьер, уравнение Дирака

THEORETICAL STUDY OF THE EFFECT OF SCATTERING CENTERS ON WAVE-PACKET DYNAMICS IN GRAPHENE

Abstract. In this work, the dynamics of an electron wave packet in a graphene monolayer is theoretically studied in the presence of linearly arranged circular electrostatic scattering centers. The main objective is to determine how the transmission probability of the wave packet through the potential region changes when the scattering centers are brought closer together, leading to partial or complete overlap of their potential regions. The calculations are performed within the framework of the Dirac continuum model using the split-operator method. The results show that an increase in the number of scattering centers leads to a reduction in the transmission probability of the wave packet, while this effect becomes more pronounced at higher potential barrier heights.

Keywords: graphene, wave packet, electrostatic potential, potential barrier, Dirac equation.

KIRISH

Grafen bir qator g'ayri oddiy xususiyatlari tufayli zamonaviy nanoelektronika uchun eng istiqbolli materiallardan biri bo'lib qolmoqda [1-4]. Dirak-fermionlarga o'xshash kvazi-zarrachalarning deyarli to'siqsiz tarqalishi va uzun sochilish yo'llari grafenda to'lqin tabiatidagi transport hodisalarini, va geometriya bilan boshqariladigan tunnellanish jarayonlarini kuzatish imkonini beradi [3-6]. Shu bilan birga, real namunalar turli turdagi nuqsonlar va zaryadli uyumlar tufayli murakkab potensial manzara hosil qilib, grafenning elektron va transport xossalriga sezilarli ta'sir ko'rsatadi [7-10].

Grafenda kvazizarralar dinamikasini to'lqin paketi yondashuvi asosida o'rganish, vaqtga bog'liq tunnellanish jarayonlarini tahlil qilish imkonini beradi [11-14]. Dirak uzluksiz modeli va operatorlarni ajratish usuli yordamida olib borilgan hisoblashlar turli potensial to'siqlar va tartibli panjara kabi sun'iy potentsiallar to'lqin paketining qanday tarqalishini ko'rsatib bergan [15-17]. So'nggi ishlar davriy joylashgan elektrostatik to'siqlar to'lqin paketining potensial sohadan o'tish ehtimolligi va fazoviy profilini sezilarli darajada o'zgartirishi, natijada grafen nanotuzilmalarida boshqariladigan transport rejimlari hosil bo'lishini ko'rsatdi.

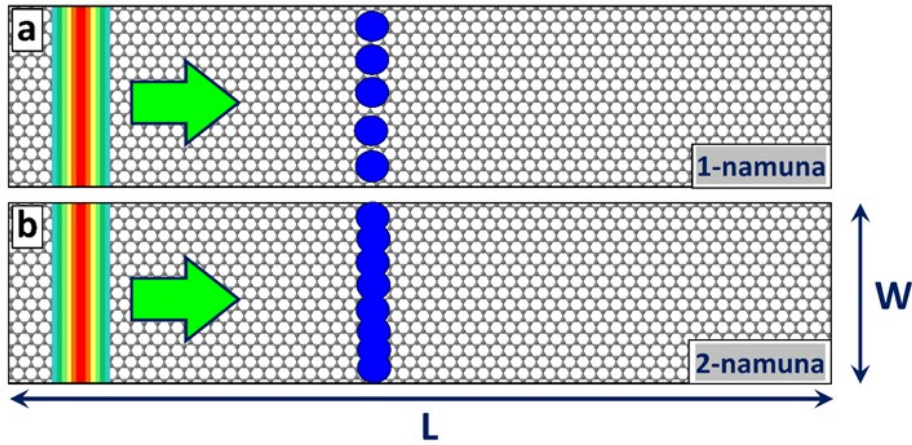
Grafenda sochuvchi markazlarning soni, balandligi (potensialning qiymati) va o'lchami (radiusi) joylashuvini o'zgartirish orqali elektron to'lqin paketlari uchun fazoviy filtrlash va rektifikatsiya kabi to'lqin-optik funksiyalarni amalga oshirish mumkinligini ko'rsatuvchi nazariy va tajribaviy natijalar ham paydo bo'lmoqda [18-21]. Biroq, ushbu ishlarning aksariyati davriy yoki murakkab panjara konfiguratsiyalariga qaratilgan bo'lib, yakka yoki cheklangan sondagi sochuvchi markazlar bilan o'zaro ta'sirda Gauss tipidagi to'lqin paketlar dinamikasining vaqt bo'yicha tahlili hali yetarlicha o'rganilmagan. Aynan bunday minimal konfiguratsiyalar chiziqli, nochiziqli va kvazi-ballistik rejimlar o'rtasidagi o'tishlarni tushunish, shuningdek, kelajakdagi elektron optik elementlar dizayni uchun sodda, lekin ma'lumotga boy model tizim sifatida alohida ahamiyatga ega.

Mazkur ishda grafendagi doirasimon elektrostatik sochuvchi markazlar ishtirokida Gauss to'lqin paketi dinamikasining nazariy tahlili taqdim etiladi. Bunda Dirak uzluksiz modeli operatorlarni ajratish sxemasi asosida to'lqin paketining sochuvchi markazlar bilan o'zaro ta'sir jarayonida o'tish va qaytish ehtimolliklari hisoblab chiqiladi. E'tibor, avvalo, sochuvchi markazlarning soni, o'lchami va geometrik joylashuvi o'zgarishi bilan to'lqin paketi dinamikasida yuzaga keladigan o'zgarishlarga qaratiladi; olingan natijalar grafenda geometriya bilan boshqariladigan elektron-optik funksional elementlarni loyihalash uchun qo'llanilishi mumkin bo'lgan dizayn tamoyillarini shakllantiradi.

MODEL TIZIM VA NAZARIY QISM

Ushbu tadqiqotimizda qaralayotgan model tizimning sxematik tasviri 1-rasmda keltirilgan. Tizim o'lchamlari $L=1024$ nm (uzunligi) va $W=128$ nm (kengligi) bo'lgan grafen monoqatlamidan iborat bo'lib, uning ichiga doira shaklidagi elektrostatik potensial baryerlar joylashtirilgan. Tadqiqot doirasida rasmda keltirilgan kabi joylashgan potentsiallar ko'rib chiqildi: (a) 1-namuna doiraviy potensial to'siqlar o'zaro biror uzoqlikda joylashgan; (b) 2-namuna esa sochuvchi markazlar o'zaro yaqinlashtirib boriladi va uning to'lqin paketi dinamikasiga ta'siri o'rganiladi. Elektron to'lqin paketi grafenning chap chegarasidan boshlang'ich impuls bilan x-yo'nalish bo'ylab tarqaladi. Ishda asosan ikkita konfiguratsiya ko'rsatilgan: 1-namunada doirasimon sochuvchi markazlar grafen monoqatlamida joylashtirilgan bo'lib ular orasida masofa kattaroq. Bu holatda har bir sochuvchi markaz alohida lokal potensial to'siq sifatida namoyon bo'ladi. 2-namunada esa doirasimon sochuvchi markazlar bir-biriga yaqin joylashib, hatto o'zaro kesishadi. Natijada alohida sochuvchilarning potensial sohalari o'zaro ustma-ust tushadi va grafen monoqatlamini samarali to'siqsimon muhit vujudga keladi. Bu konfiguratsiya to'lqin paketining to'siqli sohadan o'tishi va qaytish ehtimolliklarini keskin o'zgartirishi kutiladi.

Har ikkala namuna uchun sochuvchi markazlarning radiusi va potensial balandligi bir xil saqlanadi; farq faqat ularning o'zaro masofasi va joylashuv tartibi bilan belgilanadi. Bu esa to'liqin paketi dinamikasiga potentsiallarni o'zaro kesishishi jarayoni ta'sirini bevosita solishtirish imkonini beradi. Potensial to'siqlar radiusi $R = 10$ nm etib tanlandi. Potensial to'siqlarning ta'sirini o'rganish maqsadida 20 dan 300 meV gacha bo'lgan qiymatlari oralig'i tanlandi.



1-rasm. Grafenda to'liqin paketining tarqalishining sxematik tasviri keltirilgan. Rangli to'liqin fronti va yashil yo'nalish to'liqin paketining harakati yo'nalishini ifodalaydi. Ko'k rang sochuvchi markazlarni, ya'ni potensial to'siqlarni bildiradi.

Natijalar Dirak uzluksiz modelining qo'llanilishi doirasida, ya'ni Dirak konusi atrofida (quyi energiya sohasida) qolishini ta'minlash uchun to'liqin paketining energiyasi va o'lchami, mos ravishda, $E=100$ meV va $a_x=10$ nm ga teng qilib olindi, hamda relyativistik kvazizarrani Gauss to'liqin paketi deb qaraldi. Xususan, Gauss to'liqin fronti olinib, u x – yo'nalishida chekli kenglikka ega va quyidagicha ifodalanadi:

$$\Psi(x, y, 0) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx - \frac{x^2}{2a_x^2}} \quad (1)$$

bu yerda N – normallashtirish doimiysi, x – yo'nalish bo'ylab to'liqin tarqalishini ta'minlash uchun psevdospinor $\langle \sigma_x \rangle = 1$ va $\langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$ etib tanlangan. To'liqin paketining tarqalishi, dastlabki to'liqin paketiga qo'llaniladigan vaqt evolyutsiyasi operatori orqali ifodalanadi:

$$\Psi(x, y, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \Delta t} \Psi(x, y, t) \quad (2)$$

bu yerda H – grafenda quyi energiyalardagi elektron uchun Gamilton operatori bo'lib, quyidagicha ifodalanadi:

$$H = v_F (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) + V(x, y) \mathbf{I}, \quad (3)$$

bu yerda v_F – Fermi tezligi ($v_F \approx 10^6$ m/s), $\vec{\sigma}$ Pauli matritsalar va $\mathbf{I}$ birlik matritsasi, $V(x, y)$ esa skalyar potentsialni ifodalaydi [22,23]. To'liqin funksiyalari psevdospinorlar sifatida yoziladi $\Psi = (\Psi_A \ \Psi_B)^T$, bunda Ψ_A va Ψ_B mos ravishda elektronning A va B panjaralarida bo'lishi ehtimollikiga mos keladi. Qulaylik uchun operatorlarni ajratish usuli qo'llanildi [15-17]:

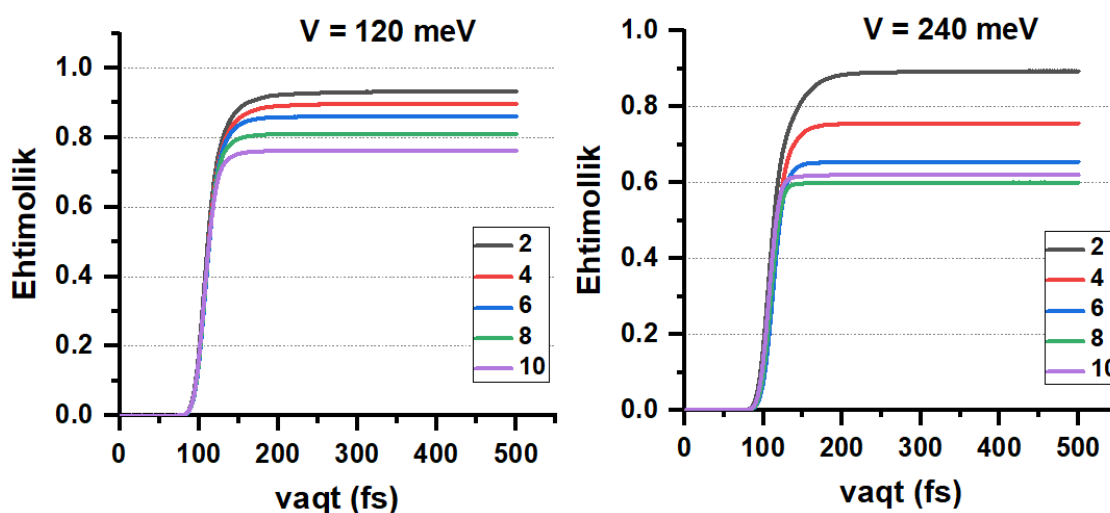
$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} H \Delta t \right] = \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} V(x, y) \mathbf{I} \Delta t \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} v_F \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \Delta t \right] \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} V(x, y) \mathbf{I} \Delta t \right], \quad (4)$$

$O(\Delta t^3)$ va undan yuqori tartib shartlari e'tiborga olinmadi. Ushbu yondashuv haqiqiy va teskari fazolarda samarali takrorlash imkonini beradi hamda Furye almashtirish va $p = \hbar \vec{k}$ orqali impuls

operatorining aniq farqlanishiga yo‘l qo‘ymaydi. Bundan tashqari, Pauli matritsalarini o‘z ichiga olgan matritsalarini qayta shakllantirish mumkin [15]. Hisoblashlar $\Delta t = 0,1$ fs vaqt qadami bilan amalga oshirildi va to‘siq mavjud bo‘lgan sohadan oldin, soha oralig‘ida va sohadan keyin elektronning topilish ehtimolligi hisoblandi. To‘siqli sohadan o‘tish ehtimolligi (P) qilib olindi. Davriy chegara shartlari bilan bog‘liq sonli takrorlanishning oldini olish uchun 1024×128 nm bo‘lgan yetarlicha katta o‘lchamlar tanlandi.

NATIJALAR VA ULARNING MUHOKAMASI

Ushbu bo‘limda grafen monoqatlamida bir chiziq bo‘ylab joylashgan doirasimon sochuvchi markazlar sonining to‘lqin paketining shu sohadan o‘tishiga ta’siri tahlil qilinadi. Hisoblashlarda to‘lqin paketi o‘lchami 10 nm bo‘lgan va energiyasi $E = 100$ meV ga teng deb olindi. Bu parametrlar to‘lqin paketining potensial soha bilan o‘zaro ta’sirini barqaror modellashdirish imkonini beradi.



2-rasm. Grafen monoqatlamida joylashgan doirasimon sochuvchi markazlar soni 2, 4, 6, 8, va 10 bo‘lganda to‘lqin paketining potensial to‘siqlar joylashgan hududdan o‘tish ehtimolligining vaqtga bog‘liqligi. Chap panelda potensial to‘siq balandligi $V = 120$ meV, o‘ng panelda esa $V = 240$ meV bo‘lgan qiymatlari uchun natijalar keltirilgan.

Doirasimon potensial to‘siqlar soni 2, 4, 6, 8, va 10 bo‘lgan holatlar ko‘rib chiqildi. 2-rasmda to‘lqin paketining potensial hududdan o‘tish ehtimolligining vaqtga bog‘liqligi ikkita turli potensial qiymatlari uchun keltirilgan: 120 meV (chapdagi grafik) va 240 meV (o‘ngdagi grafik). Barcha holatlarda to‘lqin paketining to‘siqli sohadan o‘tish ehtimolligi vaqt o‘tishi bilan keskin ortib, taxminan 150 fs dan keyin to‘yingan qiymatga yetadi. Chapdagi grafikdan ko‘rinishicha, $V = 120$ meV bo‘lganda to‘lqin paketining energiyasi potensial to‘siq balandligiga yaqin bo‘lishiga qaramay, o‘tish ehtimolligi nisbatan yuqori qiymatlarda saqlanadi. Potensial to‘siqlar soni 2 ta sochuvchi markazdan iborat bo‘lgan holatda to‘lqin paketining bu sohadan o‘tish ehtimolligi taxminan 0.9 dan yuqori qiymatga yetadi. Sochuvchi markazlar soni ortib borgan sari, yani ularning soni 4, 6, 8, va 10 ta bo‘lsa, to‘lqin paketini ushbu sohadan o‘tish ehtimolligi muntazam ravishda kamayadi.

Bu kamayish to‘lqin paketining bir qatorda joylashgan potensial to‘siqlar bilan ko‘p martalik sochilishi kuchayishi bilan izohlanadi. Har bir qo‘shimcha sochuvchi markaz to‘lqin paketini qisman qaytaradi, natijada o‘tish ehtimolligi nisbatan kamayib boradi. Shunga qaramay, grafenga xos bo‘lgan relativistik xususiyatlar sababli, hatto 10 ta sochuvchi markaz mavjud holat uchun ham o‘tish ehtimolligi ≈ 0.75 atrofida saqlanib qoladi, bu esa to‘lqin paketining sezilarli darajada tunnellanish qobiliyatiga ega ekanligini ko‘rsatadi.

Potensial to‘siq qiymati 240 meV bo‘lgan holatda to‘lqin paketining energiyasidan ancha yuqori bo‘lib, bu o‘tish ehtimolligining keskin kamayishiga olib keladi. To‘siqlar soni 2 ta bo‘lgan holatda ham o‘tish ehtimolligi, chapdagi grafik (120 meV) holatiga nisbatan kichikroq bo‘lib, sochuvchi markazlar soni ortishi bilan yanada kamayadi.

Xususan, sochuvchi markazlar 10 ta bo'lgan holatda o'tish ehtimolligi taxminan 0.6 atrofida to'yinadi. Bu natija bir-biriga yaqin joylashgan ko'p sonli doirasimon potensial to'siqli muhit hosil qilishi va to'lqin paketining bu hududdan o'tishini sezilarli darajada cheklashi bilan bog'liq. Potensial balandligining ortishi to'siqdan qaytish ehtimolligini ortishiga va o'tgan to'lqinlar ehtimolligini kamayishiga olib keladi.

Har ikkala potensial holatni solishtirish shuni ko'rsatadiki, elektron to'lqin paketining dinamikasi sochuvchi markazlar soni va potensial to'siq balandligiga juda sezgir. Sochuvchi markazlar sonining ortishi bilan ularning potensial sohalari qisman yoki to'liq ustma-ust tushib, to'lqin paketining interferensiya manzarasini tubdan o'zgartiradi. Natijada, grafenda kvazizarra transportini potensial to'siq balandligi, geometrik joylashuvi va to'lqin paketining boshlang'ich parametrlari orqali samarali boshqarish mumkinligi namoyon bo'ladi.

Bu natijalar grafen asosidagi nanoelektron qurilmalarda tashqi elektrostatik potensiallar yordamida elektron oqimini nazorat qilish, shuningdek, turli funksional to'siq va filtr strukturalarini loyihalash uchun muhim ahamiyatga ega.

XULOSA

Ushbu ishda grafen monoqatlamida joylashgan doirasimon elektrostatik sochuvchi markazlarning to'lqin paketi dinamikasiga ta'siri nazariy jihatdan o'rganildi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, sochuvchi markazlar sonining ortishi bilan to'lqin paketining potensial to'siqlar mavjud hududdan o'tish ehtimolligi kamayadi, bu esa ko'p martalik sochilishlar bilan bog'liq. Potensial baryerning kichik qiymatlarida grafenga xos relativistik xususiyatlar tufayli o'tish ehtimolligi nisbatan yuqori bo'lib qolsa, potensial to'siqlarning katta qiymatlarida o'tish ehtimolligi sezilarli darajada kamaydi. Bir-biriga yaqin joylashgan (o'zaro kesishuvchi) sochuvchi markazlar samarali uzluksiz to'siqsimon muhit hosil qilib, to'lqin paketining tarqalishini cheklaydi.

Olingan natijalar grafenda elektron transportni potensial balandligi va sochuvchi markazlar konfiguratsiyasi orqali boshqarish mumkinligini ko'rsatadi hamda grafen asosidagi nanoelektron qurilmalarni loyihalashda muhim nazariy asos bo'lishi mumkin.

REFERENCES

- [1] K. S. Novoselov, *et al.*, Science 306, 666 (2004).
- [2] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nat. Mater. 6, 169 (2007).
- [3] A. K. Geim, Science 324, 1530 (2009).
- [4] A. H. Castro Neto, *et al.*, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- [5] S. Das Sarma, *et al.*, Rev. Mod. Phys. 83, 407 (2011).
- [6] J. Martin, *et al.*, Nat. Phys. 4, 144 (2008).
- [7] Y. Zhang, *et al.*, Nat. Phys. 5, 722 (2009).
- [8] E. R. Mucciolo and C. H. Lewenkopf, J. Phys.: Condens. Matter 22, 273201 (2010).
- [9] G. Sundaram and Q. Niu, Phys. Rev. B 59, 14915 (1999).
- [10] J. W. Braun, Q. Su, and R. Grobe, Phys. Rev. A 59, 604 (1999).
- [11] E. Romera and F. de los Santos, Phys. Rev. B 80, 165416 (2009).
- [12] A. Chaves, *et al.*, Phys. Rev. B 82, 205430 (2010).
- [13] A. Chaves, *et al.*, Commun. Comput. Phys. 17, 850 (2015).
- [14] S. Palpacelli, *et al.*, Int. J. Mod. Phys. C 23, 1250080 (2012).
- [15] Kh. Rakhimov, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter 23, 275801 (2011).
- [16] M. Suleimanov, *et al.*, Physica B 714, 417484 (2025).
- [17] Kh. Rakhimov, *et al.*, J. Appl. Phys. 137, 144302 (2025).
- [18] E. Paredes-Rocha, *et al.*, Phys. Rev. B 103, 045404 (2021).
- [19] Sh. Chen, *et al.*, Science 353, 1522 (2016).
- [20] P. Rickhaus, *et al.*, Appl. Phys. Lett. 107, 251901 (2015).
- [21] Chen-Di Han, Hong-Ya Xu, and Ying-Cheng Lai, Phys. Rev. Research 2, 033406 (2020).
- [22] M.M. Musaxanov va A.S. Rahmatov, Nazariy fizika kursi, III jild. Kvant mexanikasi, «Tafakkur bo'stoni» 2011 yil, 352 b.
- [23] M.I. Katsnelson, The Physics of Graphene (2nd Edition), Cambridge University Press (2020),

425 p.