NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI, [2026-8]
ISSN:2181-1458
ISSN:2181-0427

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

2D YARIMO‘ TKAZGICHLARDA TWIST BURCHAGINING ELEKTRON ZONALAR TUZILISHIGA TA’SIRINI KVANT-MEXANIK MODELLASHTIRISH

Usmonova Mohlaroyim Muhammadjon qizi
Andijon davlat pedagogika instituti

Annotatsiya. *Mazkur maqolada 2D yarimo‘ tkazgichlarda qatlamlarning o‘ zaro burilish burchagi (twist angle) o‘ zgarishining elektron zonalar tuzilishiga ta’siri kvant-mexanik modellashtirish asosida tadqiq etiladi. Ikki o‘ lchamli materiallarda qatlamlararo burilish natijasida hosil bo‘ ladigan moiré strukturalarning elektron energetik spektri, zonalar dispersiyasi va taqiqlangan zona kengligiga ta’siri nazariy jihatdan tahlil qilinadi. Twist burchagining o‘ zgarishi natijasida elektron holatlarining lokalizatsiyasi, qatlamlararo o‘ zaro ta’sir va elektronlarning effektiv massasi kabi parametrlarning o‘ zgarish mexanizmlari yoritiladi. Tadqiqotda kvant-mexanik yondashuvlar, jumladan, zichlik funksionali nazariyasi (DFT), tight-binding modeli va moiré superpanjara asosidagi kontinuum modellaridan foydalanish imkoniyatlari ko‘ rib chiqiladi. Olingan nazariy natijalar twist burchagini boshqarish orqali 2D yarimo‘ tkazgichlarning elektron xossalarini maqsadli ravishda o‘ zgartirish va ularning nanoelektronika, optoelektronika hamda kvant texnologiyalaridagi potensial qo‘ llanilishlarini asoslash imkonini beradi.*

Kalit so‘ zlar: *2D yarimo‘ tkazgichlar, twistronika, twist burchagi, moiré struktura, moiré superpanjara, elektron zonalar tuzilishi, energetik spektr, band gap, qatlamlararo o‘ zaro ta’sir, kvant-mexanik modellashtirish, zichlik funksionali nazariyasi, DFT, tight-binding modeli, elektron holatlar, elektron dispersiyasi, effektiv massa, nanoelektronika, optoelektronika, kvant texnologiyalari*

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УГЛА ПОВОРОТА НА ЭЛЕКТРОННУЮ ЗОННУЮ СТРУКТУРУ 2D-ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Аннотация. *В статье исследуется влияние угла взаимного поворота слоев (twist angle) в двумерных полупроводниках на структуру электронных зон с использованием методов квантово-механического моделирования. Теоретически анализируется влияние возникающих при относительном повороте слоев мозаичных структур на энергетический спектр электронов, дисперсию зон и ширину запрещенной зоны. Рассматриваются механизмы изменения локализации электронных состояний, межслойного взаимодействия и эффективной массы носителей заряда в зависимости от угла поворота. Особое внимание уделяется возможностям применения квантово-механических подходов, включая теорию функционала плотности (DFT), tight-binding модель и континуальные модели моире-сверхрешетки. Полученные теоретические результаты позволяют определить закономерности управления электронными свойствами двумерных полупроводников посредством изменения угла поворота слоев и обосновать перспективы их применения в наноэлектронике, оптоэлектронике и квантовых технологиях.*

Ключевые слова: *двумерные полупроводники, твистроника, угол поворота, моире-структура, моире-сверхрешетка, структура электронных зон, энергетический спектр, запрещенная зона, межслойное взаимодействие, квантово-механическое моделирование, теория функционала плотности, DFT, tight-binding модель, электронные состояния, электронная дисперсия, эффективная масса, наноэлектроника, оптоэлектроника, квантовые технологии*

QUANTUM-MECHANICAL MODELING OF THE EFFECT OF THE TWIST ANGLE ON THE ELECTRONIC BAND STRUCTURE OF 2D SEMICONDUCTORS

Abstract. *This paper investigates the influence of the twist angle between layers in two-dimensional semiconductors on their electronic band structure using quantum-mechanical modeling approaches. The study theoretically analyzes the effects of moiré structures formed by the relative rotation of atomic layers on the electronic energy spectrum, band dispersion, and band gap. The mechanisms governing changes in the localization of electronic states, interlayer interactions, and effective carrier mass as a function of the twist angle are considered. Particular attention is given to quantum-mechanical approaches, including density functional theory (DFT), tight-binding models, and continuum models based on moiré superlattices. The theoretical analysis provides an opportunity to identify the dependence of the electronic properties of two-dimensional semiconductors on the twist angle and to establish the potential of twist-angle engineering for controlling their electronic characteristics. The obtained results are relevant to the development of advanced nanoelectronic, optoelectronic, and quantum devices based on two-dimensional semiconductor materials.*

***Keywords**: two-dimensional semiconductors, twistronics, twist angle, moiré structure, moiré superlattice, electronic band structure, energy spectrum, band gap, interlayer interaction, quantum-mechanical modeling, density functional theory, DFT, tight-binding model, electronic states, band dispersion, effective mass, nanoelectronics, optoelectronics, quantum technologies*

KIRISH.So‘ nggi yillarda ikki o‘ lchamli (2D) materiallarning fundamental fizik xususiyatlarini chuqur o‘ rganish va ularning funksional imkoniyatlaridan nanoelektronika, optoelektronika hamda kvant texnologiyalarida foydalanish zamonaviy kondensirlangan muhit fizikasi va materialshunoslikning istiqbolli yo‘ nalishlaridan biriga aylandi. Ikki o‘ lchamli materiallar atomlarning bir yoki bir necha qatlamidan tashkil topgan bo‘ lib, ularning elektron, optik, mexanik va transport xossalari uch o‘ lchamli hajmiy materiallardan sezilarli darajada farq qiladi. Ayniqsa, qatlamlararo o‘ zaro ta’sirni boshqarish imkoniyati 2D materiallarning fizik xususiyatlarini tashqi parametrlar orqali modulyatsiya qilish uchun yangi imkoniyatlarni yuzaga keltirmoqda.2D yarimo‘ tkazgichlar ushbu materiallar sinfining muhim vakillaridan biri hisoblanadi. Ularning elektron xossalarini tavsiflashda elektron zonalar tuzilishi, valent zona, o‘ tkazuvchanlik zonasi, taqiqlangan zona (band gap), Fermi sathi, elektron holatlar zichligi (DOS) va zaryad tashuvchilarning effektiv massasi kabi fundamental tushunchalar asosiy ahamiyatga ega. Mazkur parametrlar materialning elektr o‘ tkazuvchanligi, optik yutilishi, fotolyuminessensiyasi va boshqa fizik xususiyatlarini belgilaydi. Shuning uchun 2D yarimo‘ tkazgichlarning elektron zonalar tuzilishini boshqarish yangi avlod elektron va optoelektron qurilmalarini yaratish uchun muhim ilmiy vazifa hisoblanadi.

2D materiallarning elektron xossalarini boshqarishning zamonaviy usullaridan biri twistronika (twistronics) hisoblanadi. Twistronika — ikki yoki undan ortiq atomar yupqa qatlamlarning bir-biriga nisbatan ma’lum burilish burchagi (twist angle) ostida joylashtirilishi natijasida materialning elektron va boshqa kvant xossalarini boshqarishga asoslangan ilmiy yo‘ nalishdir. Bunda qatlamlarning o‘ zaro burilishi oddiy geometrik o‘ zgarish bo‘ lib qolmasdan, tizimning yangi davriylik xususiyatlarini yuzaga keltiradi. Xususan, kristall panjaralarning nisbiy burilishi natijasida moiré naqshi yoki moiré strukturasi hosil bo‘ ladi. Ushbu struktura 2D geterostrukturaning elektron energetik spektriga sezilarli ta’sir ko‘ rsatishi mumkin.

More superpanjara (moiré superlattice) — o‘ zaro burilgan yoki panjara parametrlari farq qiladigan ikki kristall qatlamning ustma-ust joylashishi natijasida hosil bo‘ ladigan katta effektiv davrga ega superstrukturadir. Moiré superpanjaraning davri odatda qatlamlarning panjara parametrlari va ular orasidagi burilish burchagiga bog‘ liq bo‘ ladi. Twist burchagi kichik qiymatlarga ega bo‘ lganda moiré davri sezilarli darajada kattalashadi. Natijada elektronlar uchun yangi effektiv davriy potensial shakllanib, dastlabki kristall panjaraga xos bo‘ lmagan yangi elektron holatlarning yuzaga kelishiga sharoit yaratiladi.

Twist burchagining o‘ zgarishi 2D yarimo‘ tkazgichlarning elektron zonalar tuzilishiga bevosita ta’sir ko‘ rsatishi mumkin. Qatlamlar orasidagi burilish burchagi o‘ zgarganda elektron to‘ lqin funksiyalarining o‘ zaro qoplanishi, qatlamlararo tunnellanish, interqatlam gibridlanishi va effektiv davriy potensialning xarakteri ham o‘ zgaradi. Natijada valent va o‘ tkazuvchanlik zonalarining dispersiyasi, band gap kattaligi, zonalarning lokalizatsiyasi va elektron holatlar zichligi kabi parametrlar o‘ zgarishi mumkin. Shu jihatdan twist burchagi 2D yarimo‘ tkazgichlarda elektron xossalarni boshqaruvchi muhim tashqi geometrik parametr sifatida qaraladi.

2D yarimo‘ tkazgichlarning elektron xossalarini chuqur tadqiq etishda kvant-mexanik modellashtirish muhim nazariy vosita hisoblanadi. Kvant-mexanik modellashtirish atom va elektronlar tizimining fizik holatini fundamental kvant qonunlari asosida ifodalash imkonini beradi. Bunda tizimning Hamiltoniani, elektron to‘ lqin funksiyasi, energiya o‘ ziga xos qiymatlari va elektron zichligi kabi kattaliklar aniqlanadi. Hisoblash natijasida materialning elektron zonalar tuzilishi, band gap qiymati, holatlar zichligi va boshqa muhim parametrlarini nazariy jihatdan baholash mumkin.2D materiallarni modellashtirishda zichlik funksionali nazariyasi (Density Functional Theory — DFT) keng qo‘ llaniladigan kvant-mexanik yondashuvlardan biridir. DFT asosida ko‘ p elektronli tizimning asosiy fizik xususiyatlarini elektron zichligi orqali aniqlash imkoniyati mavjud. Ushbu metod yordamida kristall strukturaning geometriyasi optimallashtirilishi, elektron energiyalar hisoblanishi, band structure va density of states kabi parametrlar aniqlanishi mumkin. Ayniqsa, turli twist burchaklariga mos keluvchi 2D geterostrukturalarning energetik holatlarini taqqoslashda DFT hisoblashlari muhim nazariy ma’lumot beradi[1].

Bundan tashqari, katta o‘ lchamli moiré superpanjaralarni tadqiq etishda tight-binding modeli va kontinuum modeli (continuum model) kabi yondashuvlardan foydalanish samarali hisoblanadi. Tight-binding modeli elektronlarning kristall panjaradagi lokal orbitalar o‘ rtasidagi tunnellanishini hisobga olish orqali elektron energetik spektrini ifodalaydi. Kontinuum modelida esa moiré superpanjaraning katta effektiv davriyligi va elektronlarning ushbu davriy potensialdagi harakati soddalashtirilgan effektiv Hamiltonian orqali tavsiflanadi. Ushbu yondashuvlar hisoblash resurslarini kamaytirgan holda twist burchagining keng diapazonidagi fizik holatlarni o‘ rganish imkonini beradi.Ayniqsa, twist-angle engineering, ya’ni burilish burchagini muhandislik parametriga aylantirish konsepsiyasi 2D materiallarning elektron

xususiyatlarini boshqarishda muhim ahamiyat kasb etmoqda. Bunda materialning kimyoviy tarkibini o‘ zgartirmagan holda faqat qatlamlarning nisbiy orientatsiyasini o‘ zgartirish orqali elektron energetik spektrni modifikatsiya qilish imkoniyati ko‘ rib chiqiladi. Shu sababli twistronika an’anaviy material dizayniga nisbatan qo‘ shimcha boshqaruv darajasini taqdim etadi.

2D yarimo‘ tkazgichlar orasida o‘ tish metallari dixalkogenidlari (Transition Metal Dichalcogenides — TMDs) alohida ilmiy qiziqish uyg‘ otadi. MoS_2, WS_2, $MoSe_2$ va WSe_2 kabi materiallar qatlamli kristall tuzilishga, sezilarli optik javobga va qatlamlararo o‘ zaro ta’sirga ega. TMD qatlamlarining o‘ zaro burilishi natijasida hosil bo‘ ladigan moiré potensial elektron va eksiton holatlarining energetik tuzilishini sezilarli darajada o‘ zgartirishi mumkin. Shu sababli TMD asosidagi twistronik tizimlar elektronika, optoelektronika va kvant materiallari fizikasi nuqtayi nazaridan istiqbolli tadqiqot obyektlari hisoblanadi.Mazkur masalani nazariy jihatdan tadqiq etishda twist burchagini asosiy boshqariluvchi parametr sifatida tanlash muhimdir. Masalan, kichik burilish burchaklarida moiré superpanjaraning davri kattalashadi va elektronlarning effektiv davriy potensial bilan o‘ zaro ta’siri kuchayishi mumkin. Burchakning o‘ zgarishi bilan elektron zonalarining dispersiyasi, zonalararo masofa va elektron holatlarining fazoviy taqsimlanishida o‘ zgarishlar kuzatilishi mumkin. Shu nuqtayi nazardan θ — twist burchagi, L_m — moiré davri, E(k) — elektron dispersiya munosabati, E_9 — band gap kabi parametrlar o‘ rtasidagi bog‘ lanishni aniqlash tadqiqotning muhim yo‘ nalishlaridan biridir[2].

Ushbu tadqiqotning dolzarbligi shundaki, 2D yarimo‘ tkazgichlarning elektron xossalarini faqat materialning kimyoviy tarkibi yoki tashqi elektr maydoni orqali emas, balki qatlamlarning o‘ zaro geometrik orientatsiyasi orqali ham boshqarish imkoniyati mavjud. Twist burchagi yordamida elektron zonalar tuzilishini nazorat qilish mexanizmlarini aniqlash yangi avlod nanoelektron qurilmalarida energiya samaradorligini oshirish, optoelektronik javobni boshqarish va kvant holatlarini manipulyatsiya qilish uchun nazariy asos yaratadi.Shu sababli mazkur maqolada 2D yarimo‘ tkazgichlarda twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini kvant-mexanik modellashtirish masalasi asosiy tadqiqot yo‘ nalishi sifatida qaraladi. Tadqiqot doirasida twist burchagi va moiré superpanjara parametrlari o‘ rtasidagi bog‘ lanish, qatlamlararo o‘ zaro ta’sirning elektron energetik spektrga ta’siri, elektron zonalar dispersiyasining o‘ zgarishi hamda band gapning twist burchagiga bog‘ liqligini nazariy jihatdan tahlil qilish ko‘ zda tutiladi. Bunday yondashuv twistronik 2D yarimo‘ tkazgichlarning fundamental kvant xususiyatlarini tushuntirish va ularni funksional nanoelektron hamda optoelektron tizimlarda qo‘ llash imkoniyatlarini ilmiy asoslashga xizmat qiladi.

Ikki o‘ lchamli (2D) materiallar fizikasi, van der Vaals geterostrukturalari va twistronika yo‘ nalishidagi tadqiqotlar so‘ nggi yillarda kondensirlangan muhit fizikasi, kvant materialshunoslik va nanoelektronikaning jadal rivojlanayotgan sohalaridan biriga aylandi. Ayniqsa, atomar yupqa qatlamlarni bir-biriga nisbatan ma’lum burilish burchagi (twist angle, θ) ostida joylashtirish orqali ularning elektron, optik va kvant xossalarini boshqarish imkoniyati tadqiqotchilarning e’tiborini tortmoqda. Bunday tizimlarda qatlamlarning nisbiy orientatsiyasi natijasida moiré strukturasi va moiré superpanjarasi hosil bo‘ lib, ular materialning dastlabki elektron zonalar tuzilishiga yangi davriylik va effektiv potensial kiritadi. Adabiyotlarda aynan ushbu hodisa twistronikaning nazariy va eksperimental asosini tashkil etishi qayd etilgan. Twistronika tushunchasining rivojlanishida dastlab grafen asosidagi burilgan ikki qatlamli tizimlar muhim o‘ rin egallagan. Keyinchalik tadqiqotlar ushbu konsepsiyani 2D yarimo‘ tkazgichlar, xususan, o‘ tish metallari dixalkogenidlari (TMD — transition metal dichalcogenides) asosidagi tizimlarga kengaytirdi. Adabiyotlarda MoS_2, WS_2, $MoSe_2$, WSe_2 kabi TMD materiallarining qatlamlarini turli burilish burchaklarida birlashtirish orqali elektron energetik spektr, optik o‘ tishlar, eksiton holatlari va korrelyatsiyalangan elektron hodisalarni boshqarish mumkinligi ko‘ rsatilgan. Mak va Shan tomonidan berilgan sharhda yarimo‘ tkazgich moiré materiallari, ayniqsa TMD tizimlari, kuchli elektron korrelyatsiyalari, Hubbard tipidagi fizik hodisalar, topologik effektlar va moiré eksitonlarini o‘ rganish uchun muhim platforma sifatida tavsiflangan[3].

2D materiallar va van der Vaals geterostrukturalarining nazariy asoslari

2D yarimo‘ tkazgichlarni o‘ rganishga bag‘ ishlangan tadqiqotlarda ularning alohida qatlam sifatidagi elektron tuzilishi bilan ko‘ p qatlamli tizimlardagi elektron xususiyatlari o‘ rtasida sezilarli farqlar mavjudligi ko‘ rsatiladi. Bir qatlamli materiallarda elektronlarning harakati asosan ikki o‘ lchamli kristall panjara bilan belgilanadi. Ikki yoki undan ortiq qatlam birlashtirilganda esa qatlamlararo o‘ zaro ta’sir (interlayer interaction) qo‘ shimcha fizik mexanizm sifatida paydo bo‘ ladi. Van der Vaals geterostrukturalari aynan shu xususiyati bilan an’anaviy geterostrukturalardan farq qiladi: turli 2D materiallarni qatlamma-qatlam birlashtirish orqali ularning elektron va optik xususiyatlarini sun’iy ravishda loyihalash mumkin.

Adabiyotlar tahlili shuni ko‘ rsatadiki, van der Vaals geterostrukturalarida qatlamlar orasidagi bog‘ lanish kovalent bog‘ lanishga asoslangan an’anaviy geterostrukturalardan farqli ravishda asosan zaifroq van der Vaals o‘ zaro ta’sirlari bilan tavsiflanadi. Shu sababli turli panjara parametrlari, elektron zonalar tuzilishi va kimyoviy xususiyatlarga ega bo‘ lgan materiallarni bitta sun’iy struktura tarkibida birlashtirish imkoniyati yuzaga keladi. Bu esa 2D materiallarda heterointerface engineering, ya’ni interfeys xususiyatlarini boshqarish imkoniyatlarini kengaytiradi.

Biroq qatlamlarning nisbiy burilishi tizimning fizik xususiyatlarini yanada murakkablashtiradi. Agar ikki qatlamning kristall o‘ qlari bir xil yo‘ nalishda joylashmasa, ularning atomar panjaralari ustma-ust tushishi natijasida katta uzunlik masshtabiga ega bo‘ lgan moiré naqshi hosil bo‘ ladi. Shu sababli oddiy elementar katak asosida elektron tuzilishni hisoblash yetarli bo‘ lmay qolishi mumkin. Carr, Fang va Kaxiras tomonidan olib borilgan tahlilda kichik twist burchakli 2D qatlamlarda moiré uzunlik masshtabining paydo bo‘ lishi atomar masshtabdagi hisoblashni murakkablashtirishi va shu sababli ko‘ p masshtabli nazariy metodlarni ishlab chiqish zarurligi ta’kidlangan.

Mavzuga oid ilmiy adabiyotlarning muhim qismi twist burchagining 2D tizimlarning elektron xossalarini boshqaruvchi fundamental parametr ekanini ko‘ rsatadi. Ikki qatlamning nisbiy burilish burchagi θ o‘ zgarganda moiré superpanjaraning davri ham o‘ zgaradi. Kichik twist burchaklarida moiré uzunlik masshtabi kattalashib, elektronlar uchun yangi effektiv davriy potensial shakllanadi. Natijada asl kristall panjaraning elektron zonalariga qo‘ shimcha modulyatsiya kiritiladi. Zamonaviy sharhlarda moiré superpanjaralarning elektron zonalarini twist burchagi, qatlamlarning stacking konfiguratsiyasi, bosim va deformatsiya kabi parametrlar orqali boshqarish mumkinligi qayd etilgan. Moiré superpanjara tushunchasi faqat geometrik effekt sifatida emas, balki elektronlarning kvant holatlarini o‘ zgartiruvchi effektiv potensial sifatida ham qaraladi. Bunda elektronning to‘ lqin funksiyasi moiré davriyligi bilan bog‘ liq ravishda modifikatsiyalanadi. Natijada elektron zonalarining dispersiyasi o‘ zgarishi, ayrim zonalarning torayishi yoki flat band holatlarining shakllanishi mumkin. Bunday tor energetik zonalarda elektronlar orasidagi o‘ zaro ta’sirlarning nisbiy roli ortishi sababli korrelyatsiyalangan kvant holatlarni tadqiq qilish imkoniyati paydo bo‘ ladi.

Shu nuqtayi nazardan, maqolamiz uchun asosiy nazariy bog‘ lanish θ →moiré davri →effektiv potensial →elektron zonalari →band gap va elektron holatlar ketma-ketligi orqali ifodalanishi mumkin. Ushbu bog‘ lanish twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini tizimli ravishda tahlil qilish uchun konseptual asos yaratadi[4].

Elektron zonalar tuzilishini modellashtirishga oid tadqiqotlar

2D twistronik tizimlarning elektron xususiyatlarini aniqlashda turli nazariy va hisoblash metodlari ishlab chiqilgan. Ular orasida zichlik funksionali nazariyasi (Density Functional Theory — DFT), tight-binding modeli, kontinuum modeli, shuningdek, effektiv Hamiltonianlarga asoslangan yondashuvlar alohida o‘ rin tutadi. Carr, Fang va Kaxirasning keng qamrovli sharhida aynan DFT, tight-binding Hamiltonianlari va continuum modellari twisted moiré qatlamlarning elektron tuzilishini hisoblashda asosiy metodologik yondashuvlar sifatida qiyoslangan.

DFT atomlararo o‘ zaro ta’sirlar va elektron zichlikni hisobga olgan holda materialning elektron tuzilishini fundamental kvant-mexanik asosda aniqlash imkonini beradi. DFT yordamida kristall strukturaning geometrik optimallashtirilishi, qatlamlararo masofa, elektron energiyalar, band structure, density of states (DOS) va boshqa parametrlarni hisoblash mumkin. Shu bilan birga, twist burchagi kichik bo‘ lgan tizimlarda moiré superkatak tarkibidagi atomlar sonining keskin ortishi hisoblash murakkabligini oshiradi. Shuning uchun DFT yuqori aniqlikdagi lokal elektron struktura ma’lumotlarini olish uchun samarali bo‘ lsa-da, juda katta moiré superkataklar uchun hisoblash jihatidan resurs talabchan hisoblanadi.

Tight-binding modeli esa elektronlarning lokal atom orbitalari o‘ rtasidagi tunnellanishini tavsiflashga asoslanadi. Ushbu yondashuvda tizimning Hamiltoniani hopping parametrlar orqali ifodalanib, elektronlarning kristall panjaradagi harakatini hisoblash imkonini beradi. Uning asosiy afzalligi — atomlar soni katta bo‘ lgan tizimlarda DFTga nisbatan hisoblash yuklamasining kamayishi. Shu sababli twist burchagining turli qiymatlarida elektron zonalar tuzilishini tezkor taqqoslashda tight-binding modeli muhim vosita hisoblanadi. Adabiyotlarda ushbu model DFT va continuum yondashuvlari bilan birgalikda qo‘ llanib, turli masshtablardagi elektron hodisalarni o‘ zaro bog‘ lash uchun ishlatilgani ko‘ rsatilgan. Kontinuum modeli esa ayniqsa kichik twist burchaklarida katta moiré superpanjaralar bilan ishlash uchun qulaydir. Bunda atomlarning har birini alohida hisoblash o‘ rniga elektronlarning moiré masshtabidagi effektiv harakati matematik Hamiltonian orqali ifodalanadi. Mazkur yondashuv elektron zonalarining qayta shakllanishi, moiré bandlari va twist burchagiga bog‘ liq energetik holatlarni tahlil qilishda katta imkoniyat beradi. Shunday qilib, DFT, tight-binding va continuum modellari bir-birini to‘ ldiruvchi metodlar sifatida qaraladi: DFT atomistik aniqlikni, tight-binding modeli panjara darajasidagi elektron dinamikasini, continuum modeli esa katta moiré masshtabidagi fizikani tavsiflash imkonini beradi.

Adabiyotlarda TMD materiallari twistronik yarimo‘ tkazgich tizimlarining eng faol o‘ rganilayotgan guruhlaridan biri sifatida ajratib ko‘ rsatiladi. Bunga ularning ikki o‘ lchamli kristall tuzilishi, kuchli spin-orbit o‘ zaro ta’siri, vodiy (valley) fizikasi va optik xususiyatlari sabab bo‘ ladi. TMD qatlamlarining burilishi elektron zonalarining qayta shakllanishidan tashqari, eksiton — elektron va kovakning Kulon o‘ zaro ta’siri natijasida hosil bo‘ ladigan bog‘ langan kvazizarracha — holatlariga ham ta’sir ko‘ rsatadi. Semiconductor moiré materiallari bo‘ yicha sharhlar TMD tizimlarida moiré potensialining korrelyatsiyalangan elektron holatlari va eksiton fizikasi uchun yangi imkoniyatlar yaratganini ko‘ rsatadi.

Eksitonlarga bag‘ ishlangan tadqiqotlarda moiré superpanjaraning elektron va kovak holatlarini fazoviy chegaralashi natijasida yangi optik rezonanslar paydo bo‘ lishi va ularning energiyasi hamda dinamik xususiyatlari twist

burchagi orqali boshqarilishi mumkinligi ko‘ rsatilgan. Bu natijalar twist burchagi nafaqat elektron zonalar tuzilishi, balki optik spektr va kvant holatlarning fazoviy lokalizatsiyasini boshqarishda ham muhim parametr ekanini ko‘ rsatadi.

2026-yilgi tadqiqot yo‘ nalishlarida esa past twist burchakli TMD tizimlarida moiré potensial manzarasini va eksitonlarning lokalizatsiyasini atomar masshtabda aniqlashga qaratilgan yangi eksperimental usullar ham rivojlanmoqda. Masalan, 2° burilishli MoS_2 ikki qatlamida eksiton javobining moiré katak ichidagi fazoviy taqsimlanishini yuqori aniqlikda xaritalash imkoniyatlari haqida yangi natijalar e’lon qilingan. Bu holat nazariy modellashtirishda elektron va eksiton holatlarining faqat o‘ rtacha energetik parametrlarini emas, balki ularning fazoviy lokalizatsiyasini ham hisobga olish zarurligini ko‘ rsatadi.

Moiré superpanjaralar bo‘ yicha zamonaviy adabiyotlarda flat band, ya’ni dispersiyasi juda kichik bo‘ lgan energetik zonalar alohida tadqiqot obyekti sifatida qaralmoqda. Elektron zonasi torayganda elektronlarning kinetik energiyasi kamayib, elektron-elektron o‘ zaro ta’sirlarining nisbiy ahamiyati ortishi mumkin. Natijada oddiy mustaqil elektron modeli bilan tushuntirib bo‘ lmaydigan kuchli korrelyatsiyalangan elektron holatlari yuzaga kelishi mumkin. Semiconductor moiré materiallari bo‘ yicha sharhlarda Hubbard fizikasi, Kane–Mele–Hubbard modellari va boshqa korrelyatsiyalangan holatlarni o‘ rganish uchun TMD moiré tizimlaridan foydalanish imkoniyatlari batafsil muhokama qilingan. Bunday natijalar maqolamiz mavzusi uchun muhim metodologik ahamiyatga ega. Chunki twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini o‘ rganish faqat band gapning o‘ zgarishini aniqlash bilan cheklanmasligi kerak. Elektron zonalarining dispersiyasi, zonalar kengligi, lokalizatsiyasi, DOS, effektiv massa va moiré potensial bilan bog‘ liq holatlar ham kompleks ravishda tahlil qilinishi zarur. Ana shunday yondashuv orqali twist burchagining elektron xossalarga ta’sir mexanizmini chuqurroq ochib berish mumkin.

Adabiyotlar tahlili shuni ko‘ rsatadiki, twistronik tizimlarni modellashtirishda asosiy muammolardan biri ko‘ p masshtabli struktura bilan bog‘ liq. Atomlararo masofa angstrom masshtabida bo‘ lsa, moiré superpanjara davri o‘ nlab yoki yuzlab angstromgacha kattalashishi mumkin. Shuning uchun butun tizimni bir vaqtning o‘ zida yuqori aniqlikda hisoblash juda katta hisoblash resurslarini talab qiladi. Carr va hammualliflar ushbu masalani twisted moiré qatlamlarning elektron strukturasini hisoblashdagi asosiy nazariy muammolardan biri sifatida ko‘ rsatadi.

Ikkinchi muhim muammo — atomar relaksatsiyani hisobga olish masalasidir. Ideal geometrik modelda qatlamlar faqat burilgan holda tasavvur qilinadi. Amaliy tizimda esa atomlararo kuchlar sababli atomlarning muvozanat holati ideal geometrik konfiguratsiyadan farq qilishi mumkin. Bu esa mahalliy stacking konfiguratsiyasi, qatlamlararo masofa va moiré potensialining amplitudasiga ta’sir qiladi. Shuning uchun real elektron zonalar tuzilishini aniqlashda faqat twist burchagini emas, balki geometrik relaksatsiyani ham hisobga olish maqsadga muvofiq.

Uchinchi muammo — nazariy model va eksperimental parametrlar o‘ rtasidagi moslik masalasidir. Real 2D geterostrukturalarda twist burchagi bilan bir qatorda deformatsiya, bosim, substrat ta’siri, dielektrik muhit, nuqsonlar va qatlamlararo masofa ham elektron zonalar tuzilishiga ta’sir qilishi mumkin. Shu sababli faqat ideal, erkin va mukammal kristall model asosida olingan natijalarni real qurilmalar uchun to‘ g‘ ridan-to‘ g‘ ri umumlashtirish ehtiyotkorlikni talab qiladi. Moiré superpanjaralar bo‘ yicha zamonaviy sharhlarda twist burchagi bilan bir qatorda stacking, bosim va strain kabi parametrlar ham energiya zonalarini boshqarishi mumkinligi qayd etilgan.

Yuqoridagi adabiyotlar tahlili shuni ko‘ rsatadiki, 2D twistronik materiallarning fizik xususiyatlari bo‘ yicha katta ilmiy baza shakllangan bo‘ lsa-da, twist burchagi — moiré superpanjara — elektron zonalar tuzilishi o‘ rtasidagi bog‘ lanishni yagona kvant-mexanik model doirasida tizimli ravishda tahlil qilish masalasi dolzarb bo‘ lib qolmoqda. Ayniqsa, turli twist burchaklari uchun band structure, band gap, elektron holatlar zichligi va zonalar dispersiyasini birgalikda tahlil qilish 2D yarimo‘ tkazgichlarning boshqariladigan elektron xususiyatlarini chuqurroq tushuntirish imkonini beradi.

Mavjud tadqiqotlarning yana bir muhim jihati shundaki, ko‘ plab ishlar ma’lum bir material yoki ma’lum bir twist burchagidagi fizik holatni batafsil o‘ rganishga qaratilgan. Mazkur maqolada esa twist burchagini asosiy boshqariluvchi parametr sifatida ajratib, uning elektron zonalar tuzilishidagi o‘ zgarishlarni ketma-ket tahlil qilish metodologik jihatdan maqsadga muvofiqdir. Bunda DFT, tight-binding va continuum modellarining imkoniyatlarini o‘ zaro bog‘ lash orqali atomistik va effektiv modellashtirish yondashuvlari o‘ rtasidagi farqlarni aniqlash mumkin.Shuningdek, zamonaviy tadqiqotlar moiré tizimlarini faqat elektron xususiyatlar nuqtayi nazaridan emas, balki optik, eksitonik, topologik va korrelyatsiyalangan kvant hodisalar bilan bog‘ liq holda o‘ rganishga o‘ tayotganini ko‘ rsatadi. 2026-yilgi tadqiqotlarda ham past twist burchakli TMD tizimlarining lokal elektron va eksiton xususiyatlarini yuqori fazoviy aniqlikda o‘ rganish yo‘ nalishi davom etmoqda. Demak, elektron zonalar tuzilishini aniq modellashtirish keyingi bosqichlarda optik va kvant xususiyatlarni izohlash uchun ham fundamental asos vazifasini bajaradi.

Shu asosda ushbu maqolada 2D yarimo‘ tkazgichlarda twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini kvant-mexanik modellashtirish masalasini o‘ rganish maqsadga muvofiqdir. Tadqiqotda twist angle, moiré structure, moiré superlattice, interlayer coupling, band structure, band gap, density of states, effective mass, DFT, tight-binding Hamiltonian va continuum model kabi atamalar yagona nazariy-metodologik tizimda qo‘ llanadi. Bu esa tadqiqotning

terminologik aniqligini ta’minlash bilan birga, 2D twistronik yarimo‘ tkazgichlarning elektron xossalarini boshqarish mexanizmlarini izchil ochib berishga xizmat qiladi[5].

Umuman olganda, adabiyotlar tahlili twistronik 2D yarimo‘ tkazgichlarda twist burchagini o‘ zgartirish orqali moiré superpanjara parametrlarini va shu orqali elektron zonalar tuzilishini boshqarish mumkinligini ko‘ rsatadi. Biroq bunday tizimlarda atomar relaksatsiya, qatlamlararo o‘ zaro ta’sir, hisoblash masshtabi va model tanlash kabi omillar natijalarning aniqligiga sezilarli ta’sir ko‘ rsatadi. Shu sababli maqolaning keyingi qismida twist burchagining elektron energetik spektrga ta’sirini kvant-mexanik modellashtirish, mos matematik modelni shakllantirish va turli burchak qiymatlarida elektron zonalar tuzilishining o‘ zgarish qonuniyatlarini aniqlash asosiy ilmiy vazifa sifatida belgilanadi.

Ikki o‘ lchamli (2D) materiallar fizikasi, van der Vaals geterostrukturalari va twistronika yo‘ nalishidagi tadqiqotlar so‘ nggi yillarda kondensirlangan muhit fizikasi, kvant materialshunoslik va nanoelektronikaning jadal rivojlanayotgan sohalaridan biriga aylandi. Ayniqsa, atomar yupqa qatlamlarni bir-biriga nisbatan ma’lum burilish burchagi (twist angle, θ) ostida joylashtirish orqali ularning elektron, optik va kvant xossalarini boshqarish imkoniyati tadqiqotchilarning e’tiborini tortmoqda. Bunday tizimlarda qatlamlarning nisbiy orientatsiyasi natijasida moiré strukturasi va moiré superpanjarasi hosil bo‘ lib, ular materialning dastlabki elektron zonalar tuzilishiga yangi davriylik va effektiv potensial kiritadi. Adabiyotlarda aynan ushbu hodisa twistronikaning nazariy va eksperimental asosini tashkil etishi qayd etilgan. Twistronika tushunchasining rivojlanishida dastlab grafen asosidagi burilgan ikki qatlamli tizimlar muhim o‘ rin egallagan. Keyinchalik tadqiqotlar ushbu konsepsiyani 2D yarimo‘ tkazgichlar, xususan, o‘ tish metallari dixalkogenidlari (TMD — transition metal dichalcogenides) asosidagi tizimlarga kengaytirdi. Adabiyotlarda MoS_2, WS_2, $MoSe_2$, WSe_2 kabi TMD materiallarining qatlamlarini turli burilish burchaklarida birlashtirish orqali elektron energetik spektr, optik o‘ tishlar, eksiton holatlari va korrelyatsiyalangan elektron hodisalarni boshqarish mumkinligi ko‘ rsatilgan. Mak va Shan tomonidan berilgan sharhda yarimo‘ tkazgich moiré materiallari, ayniqsa TMD tizimlari, kuchli elektron korrelyatsiyalari, Hubbard tipidagi fizik hodisalar, topologik effektlar va moiré eksitonlarini o‘ rganish uchun muhim platforma sifatida tavsiflangan.

2D yarimo‘ tkazgichlarni o‘ rganishga bag‘ ishlangan tadqiqotlarda ularning alohida qatlam sifatidagi elektron tuzilishi bilan ko‘ p qatlamli tizimlardagi elektron xususiyatlari o‘ rtasida sezilarli farqlar mavjudligi ko‘ rsatiladi. Bir qatlamli materiallarda elektronlarning harakati asosan ikki o‘ lchamli kristall panjara bilan belgilanadi. Ikki yoki undan ortiq qatlam birlashtirilganda esa qatlamlararo o‘ zaro ta’sir (interlayer interaction) qo‘ shimcha fizik mexanizm sifatida paydo bo‘ ladi. Van der Vaals geterostrukturalari aynan shu xususiyati bilan an’anaviy geterostrukturalardan farq qiladi: turli 2D materiallarni qatlamma-qatlam birlashtirish orqali ularning elektron va optik xususiyatlarini sun’iy ravishda loyihalash mumkin[6].

Adabiyotlar tahlili shuni ko‘ rsatadiki, van der Vaals geterostrukturalarida qatlamlar orasidagi bog‘ lanish kovalent bog‘ lanishga asoslangan an’anaviy geterostrukturalardan farqli ravishda asosan zaifroq van der Vaals o‘ zaro ta’sirlari bilan tavsiflanadi. Shu sababli turli panjara parametrlari, elektron zonalar tuzilishi va kimyoviy xususiyatlarga ega bo‘ lgan materiallarni bitta sun’iy struktura tarkibida birlashtirish imkoniyati yuzaga keladi. Bu esa 2D materiallarda heterointerface engineering, ya’ni interfeys xususiyatlarini boshqarish imkoniyatlarini kengaytiradi.

Biroq qatlamlarning nisbiy burilishi tizimning fizik xususiyatlarini yanada murakkablashtiradi. Agar ikki qatlamning kristall o‘ qlari bir xil yo‘ nalishda joylashmasa, ularning atomar panjaralari ustma-ust tushishi natijasida katta uzunlik masshtabiga ega bo‘ lgan moiré naqshi hosil bo‘ ladi. Shu sababli oddiy elementar katak asosida elektron tuzilishni hisoblash yetarli bo‘ lmay qolishi mumkin. Carr, Fang va Kaxiras tomonidan olib borilgan tahlilda kichik twist burchakli 2D qatlamlarda moiré uzunlik masshtabining paydo bo‘ lishi atomar masshtabdagi hisoblashni murakkablashtirishi va shu sababli ko‘ p masshtabli nazariy metodlarni ishlab chiqish zarurligi ta’kidlangan.

Mavzuga oid ilmiy adabiyotlarning muhim qismi twist burchagining 2D tizimlarning elektron xossalarini boshqaruvchi fundamental parametr ekanini ko‘ rsatadi. Ikki qatlamning nisbiy burilish burchagi θ o‘ zgarganda moiré superpanjaraning davri ham o‘ zgaradi. Kichik twist burchaklarida moiré uzunlik masshtabi kattalashib, elektronlar uchun yangi effektiv davriy potensial shakllanadi. Natijada asl kristall panjaraning elektron zonalariga qo‘ shimcha modulyatsiya kiritiladi. Zamonaviy sharhlarda moiré superpanjaralarning elektron zonalarini twist burchagi, qatlamlarning stacking konfiguratsiyasi, bosim va deformatsiya kabi parametrlar orqali boshqarish mumkinligi qayd etilgan. Moiré superpanjara tushunchasi faqat geometrik effekt sifatida emas, balki elektronlarning kvant holatlarini o‘ zgartiruvchi effektiv potensial sifatida ham qaraladi. Bunda elektronning to‘ lqin funksiyasi moiré davriyligi bilan bog‘ liq ravishda modifikatsiyalanadi. Natijada elektron zonalarining dispersiyasi o‘ zgarishi, ayrim zonalarning torayishi yoki flat band holatlarining shakllanishi mumkin. Bunday tor energetik zonalarda elektronlar orasidagi o‘ zaro ta’sirlarning nisbiy roli ortishi sababli korrelyatsiyalangan kvant holatlarni tadqiq qilish imkoniyati paydo bo‘ ladi.

Shu nuqtayi nazardan, maqolamiz uchun asosiy nazariy bog‘ lanish θ → moiré davri → effektiv potensial → elektron zonalari → band gap va elektron holatlar ketma-ketligi orqali ifodalanishi mumkin. Ushbu bog‘ lanish twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini tizimli ravishda tahlil qilish uchun konseptual asos yaratadi.

2D twistronik tizimlarning elektron xususiyatlarini aniqlashda turli nazariy va hisoblash metodlari ishlab chiqilgan. Ular orasida zichlik funksionali nazariyasi (Density Functional Theory — DFT), tight-binding modeli, kontinuum modeli, shuningdek, effektiv Hamiltonianlarga asoslangan yondashuvlar alohida o‘ rin tutadi. Carr, Fang va Kaxirasning keng qamrovli sharhida aynan DFT, tight-binding Hamiltonianlari va continuum modellari twisted moiré qatlamlarning elektron tuzilishini hisoblashda asosiy metodologik yondashuvlar sifatida qiyoslangan.

DFT atomlararo o‘ zaro ta’sirlar va elektron zichlikni hisobga olgan holda materialning elektron tuzilishini fundamental kvant-mexanik asosda aniqlash imkonini beradi. DFT yordamida kristall strukturaning geometrik optimallashtirilishi, qatlamlararo masofa, elektron energiyalar, band structure, density of states (DOS) va boshqa parametrlarni hisoblash mumkin. Shu bilan birga, twist burchagi kichik bo‘ lgan tizimlarda moiré superkatak tarkibidagi atomlar sonining keskin ortishi hisoblash murakkabligini oshiradi. Shuning uchun DFT yuqori aniqlikdagi lokal elektron struktura ma’lumotlarini olish uchun samarali bo‘ lsa-da, juda katta moiré superkataklar uchun hisoblash jihatidan resurs talabchan hisoblanadi. Tight-binding modeli esa elektronlarning lokal atom orbitalari o‘ rtasidagi tunnellanishini tavsiflashga asoslanadi. Ushbu yondashuvda tizimning Hamiltoniani hopping parametrlar orqali ifodalanib, elektronlarning kristall panjaradagi harakatini hisoblash imkonini beradi. Uning asosiy afzalligi — atomlar soni katta bo‘ lgan tizimlarda DFTga nisbatan hisoblash yuklamasining kamayishi. Shu sababli twist burchagining turli qiymatlarida elektron zonalar tuzilishini tezkor taqqoslashda tight-binding modeli muhim vosita hisoblanadi. Adabiyotlarda ushbu model DFT va continuum yondashuvlari bilan birgalikda qo‘ llanib, turli masshtablardagi elektron hodisalarni o‘ zaro bog‘ lash uchun ishlatilgani ko‘ rsatilgan.

Kontinuum modeli esa ayniqsa kichik twist burchaklarida katta moiré superpanjaralar bilan ishlash uchun qulaydir. Bunda atomlarning har birini alohida hisoblash o‘ rniga elektronlarning moiré masshtabidagi effektiv harakati matematik Hamiltonian orqali ifodalanadi. Mazkur yondashuv elektron zonalarining qayta shakllanishi, moiré bandlari va twist burchagiga bog‘ liq energetik holatlarni tahlil qilishda katta imkoniyat beradi. Shunday qilib, DFT, tight-binding va continuum modellari bir-birini to‘ ldiruvchi metodlar sifatida qaraladi: DFT atomistik aniqlikni, tight-binding modeli panjara darajasidagi elektron dinamikasini, continuum modeli esa katta moiré masshtabidagi fizikani tavsiflash imkonini beradi.

TMD yarimo‘ tkazgichlar va elektron holatlar.Adabiyotlarda TMD materiallari twistronik yarimo‘ tkazgich tizimlarining eng faol o‘ rganilayotgan guruhlaridan biri sifatida ajratib ko‘ rsatiladi. Bunga ularning ikki o‘ lchamli kristall tuzilishi, kuchli spin-orbit o‘ zaro ta’siri, vodiy (valley) fizikasi va optik xususiyatlari sabab bo‘ ladi. TMD qatlamlarining burilishi elektron zonalarining qayta shakllanishidan tashqari, eksiton — elektron va kovakning Kulon o‘ zaro ta’siri natijasida hosil bo‘ ladigan bog‘ langan kvazizarracha — holatlariga ham ta’sir ko‘ rsatadi. Semiconductor moiré materiallari bo‘ yicha sharhlar TMD tizimlarida moiré potensialining korrelyatsiyalangan elektron holatlari va eksiton fizikasi uchun yangi imkoniyatlar yaratganini ko‘ rsatadi.

Eksitonlarga bag‘ ishlangan tadqiqotlarda moiré superpanjaraning elektron va kovak holatlarini fazoviy chegaralashi natijasida yangi optik rezonanslar paydo bo‘ lishi va ularning energiyasi hamda dinamik xususiyatlari twist burchagi orqali boshqarilishi mumkinligi ko‘ rsatilgan. Bu natijalar twist burchagi nafaqat elektron zonalar tuzilishi, balki optik spektr va kvant holatlarning fazoviy lokalizatsiyasini boshqarishda ham muhim parametr ekanini ko‘ rsatadi.

2026-yilgi tadqiqot yo‘ nalishlarida esa past twist burchakli TMD tizimlarida moiré potensial manzarasini va eksitonlarning lokalizatsiyasini atomar masshtabda aniqlashga qaratilgan yangi eksperimental usullar ham rivojlanmoqda. Masalan, 2° burilishli MoS_2 ikki qatlamida eksiton javobining moiré katak ichidagi fazoviy taqsimlanishini yuqori aniqlikda xaritalash imkoniyatlari haqida yangi natijalar e’lon qilingan. Bu holat nazariy modellashtirishda elektron va eksiton holatlarining faqat o‘ rtacha energetik parametrlarini emas, balki ularning fazoviy lokalizatsiyasini ham hisobga olish zarurligini ko‘ rsatadi[7].

Moiré superpanjaralar bo‘ yicha zamonaviy adabiyotlarda flat band, ya’ni dispersiyasi juda kichik bo‘ lgan energetik zonalar alohida tadqiqot obyekti sifatida qaralmoqda. Elektron zonasi torayganda elektronlarning kinetik energiyasi kamayib, elektron-elektron o‘ zaro ta’sirlarining nisbiy ahamiyati ortishi mumkin. Natijada oddiy mustaqil elektron modeli bilan tushuntirib bo‘ lmaydigan kuchli korrelyatsiyalangan elektron holatlari yuzaga kelishi mumkin. Semiconductor moiré materiallari bo‘ yicha sharhlarda Hubbard fizikasi, Kane–Mele–Hubbard modellari va boshqa korrelyatsiyalangan holatlarni o‘ rganish uchun TMD moiré tizimlaridan foydalanish imkoniyatlari batafsil muhokama qilingan.

Bunday natijalar maqolamiz mavzusi uchun muhim metodologik ahamiyatga ega. Chunki twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini o‘ rganish faqat band gapning o‘ zgarishini aniqlash bilan cheklanmasligi kerak. Elektron zonalarining dispersiyasi, zonalar kengligi, lokalizatsiyasi, DOS, effektiv massa va moiré potensial bilan bog‘ liq holatlar ham kompleks ravishda tahlil qilinishi zarur. Ana shunday yondashuv orqali twist burchagining elektron xossalarga ta’sir mexanizmini chuqurroq ochib berish mumkin.

Yuqoridagi adabiyotlar tahlili shuni ko‘ rsatadiki, 2D twistronik materiallarning fizik xususiyatlari bo‘ yicha katta ilmiy baza shakllangan bo‘ lsa-da, twist burchagi — moiré superpanjara — elektron zonalar tuzilishi o‘ rtasidagi

bog‘ lanishni yagona kvant-mexanik model doirasida tizimli ravishda tahlil qilish masalasi dolzarb bo‘ lib qolmoqda. Ayniqsa, turli twist burchaklari uchun band structure, band gap, elektron holatlar zichligi va zonalar dispersiyasini birgalikda tahlil qilish 2D yarimo‘ tkazgichlarning boshqariladigan elektron xususiyatlarini chuqurroq tushuntirish imkonini beradi.

Mavjud tadqiqotlarning yana bir muhim jihati shundaki, ko‘ plab ishlar ma’lum bir material yoki ma’lum bir twist burchagidagi fizik holatni batafsil o‘ rganishga qaratilgan. Mazkur maqolada esa twist burchagini asosiy boshqariluvchi parametr sifatida ajratib, uning elektron zonalar tuzilishidagi o‘ zgarishlarni ketma-ket tahlil qilish metodologik jihatdan maqsadga muvofiqdir. Bunda DFT, tight-binding va continuum modellarining imkoniyatlarini o‘ zaro bog‘ lash orqali atomistik va effektiv modellashtirish yondashuvlari o‘ rtasidagi farqlarni aniqlash mumkin.Shuningdek, zamonaviy tadqiqotlar moiré tizimlarini faqat elektron xususiyatlar nuqtayi nazaridan emas, balki optik, eksitonik, topologik va korrelyatsiyalangan kvant hodisalar bilan bog‘ liq holda o‘ rganishga o‘ tayotganini ko‘ rsatadi. 2026-yilgi tadqiqotlarda ham past twist burchakli TMD tizimlarining lokal elektron va eksiton xususiyatlarini yuqori fazoviy aniqlikda o‘ rganish yo‘ nalishi davom etmoqda. Demak, elektron zonalar tuzilishini aniq modellashtirish keyingi bosqichlarda optik va kvant xususiyatlarni izohlash uchun ham fundamental asos vazifasini bajaradi.

Shu asosda ushbu maqolada 2D yarimo‘ tkazgichlarda twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini kvant-mexanik modellashtirish masalasini o‘ rganish maqsadga muvofiqdir. Tadqiqotda twist angle, moiré structure, moiré superlattice, interlayer coupling, band structure, band gap, density of states, effective mass, DFT, tight-binding Hamiltonian va continuum model kabi atamalar yagona nazariy-metodologik tizimda qo‘ llanadi. Bu esa tadqiqotning terminologik aniqligini ta’minlash bilan birga, 2D twistronik yarimo‘ tkazgichlarning elektron xossalarini boshqarish mexanizmlarini izchil ochib berishga xizmat qiladi.

Umuman olganda, adabiyotlar tahlili twistronik 2D yarimo‘ tkazgichlarda twist burchagini o‘ zgartirish orqali moiré superpanjara parametrlarini va shu orqali elektron zonalar tuzilishini boshqarish mumkinligini ko‘ rsatadi. Biroq bunday tizimlarda atomar relaksatsiya, qatlamlararo o‘ zaro ta’sir, hisoblash masshtabi va model tanlash kabi omillar natijalarning aniqligiga sezilarli ta’sir ko‘ rsatadi. Shu sababli maqolaning keyingi qismida twist burchagining elektron energetik spektrga ta’sirini kvant-mexanik modellashtirish, mos matematik modelni shakllantirish va turli burchak qiymatlarida elektron zonalar tuzilishining o‘ zgarish qonuniyatlarini aniqlash asosiy ilmiy vazifa sifatida belgilanadi.

XULOSA.Mazkur tadqiqotda 2D yarimo‘ tkazgichlarda qatlamlarning o‘ zaro burilish burchagi — twist angle (θ) ning elektron zonalar tuzilishiga ta’siri kvant-mexanik yondashuvlar nuqtayi nazaridan tahlil qilindi. Adabiyotlar tahlili shuni ko‘ rsatadiki, ikki o‘ lchamli materiallar qatlamlarini ma’lum burilish burchagi ostida joylashtirish natijasida oddiy kristall panjaradan farq qiluvchi moiré struktura va moiré superpanjara shakllanadi. Ushbu yangi davriylik elektronlarning effektiv potensialini o‘ zgartirib, materialning energetik spektri va elektron zonalar tuzilishida sezilarli modifikatsiyalarni yuzaga keltirishi mumkin. Twistronika aynan ushbu geometrik boshqaruv orqali 2D materiallarning fizik xususiyatlarini maqsadli o‘ zgartirish imkoniyatini beradi.

Tadqiqot natijalarini umumlashtirish asosida twist burchagi →moiré superpanjara →qatlamlararo o‘ zaro ta’sir → elektron zonalar tuzilishi o‘ rtasida uzviy fizik bog‘ lanish mavjudligi aniqlandi. Twist burchagining kamayishi moiré uzunlik masshtabining ortishiga olib kelishi va natijada elektronlarning moiré potensialidagi harakatini o‘ zgartirishi mumkin. Bunday o‘ zgarishlar elektron zonalarining dispersiyasi, zonalar kengligi, holatlar zichligi va ayrim holatlarda flat bandlarning shakllanishida namoyon bo‘ ladi. Twisted tizimlar bo‘ yicha nazariy ishlar moiré davriyligi elektron zonalarini qayta shakllantirishi mumkinligini ko‘ rsatadi[8].

2D yarimo‘ tkazgichlar orasida o‘ tish metallari dixalkogenidlari (TMD) asosidagi geterostrukturalar alohida ahamiyatga ega. MoS_2, WS_2, $MoSe_2$ va WSe_2 kabi materiallarda qatlamlararo o‘ zaro ta’sir, spin-orbit o‘ zaro ta’sir, vodiy erkinlik darajasi va kuchli Kulon o‘ zaro ta’siri mavjudligi ularni twistronik tadqiqotlar uchun muhim materiallar sinfiga aylantiradi. TMD geterobilayerlarida moiré superpanjara nafaqat elektron energetik holatlarni, balki eksitonlarning lokalizatsiyasi, energetik spektri va optik javobini ham o‘ zgartirishi mumkin.Kvant-mexanik modellashtirish nuqtayi nazaridan zichlik funksionali nazariyasi (DFT), tight-binding modeli va kontinuum modeli bir-birini to‘ ldiruvchi metodlar sifatida namoyon bo‘ ladi. DFT atomistik darajada kristall geometriya, elektron zichligi va elektron energetik sathlarini hisoblash imkonini bersa, tight-binding modeli katta tizimlarda elektronlarning lokal orbitalar o‘ rtasidagi tunnellanishini samarali tavsiflaydi. Kontinuum modeli esa katta o‘ lchamli moiré superpanjaralarda elektronlarning effektiv harakatini va moiré bandlarini hisoblash uchun qulaydir. Ushbu uch yondashuvning o‘ zaro uyg‘ unlashtirilishi 2D twistronik tizimlarni turli fazoviy va energetik masshtablarda tadqiq etish imkonini beradi.

Shuningdek, twist burchagining o‘ zgarishi TMD moiré tizimlarida elektron korrelyatsiyasining kuchayishiga olib kelishi mumkin bo‘ lgan tor yoki flat moiré bandlarning shakllanishi bilan bog‘ liq. Bunday zonalarda elektronlarning kinetik energiyasi nisbatan kamayib, elektron-elektron o‘ zaro ta’sirlarining roli ortadi. Nazariy tadqiqotlarda twist burchagi va dielektrik muhit orqali Hubbard modelidagi tunnellanish hamda o‘ zaro ta’sir parametrlarini boshqarish mumkinligi ko‘ rsatilgan.

Tadqiqotning muhim xulosalaridan biri shundaki, 2D yarimo‘ tkazgichlarning elektron xususiyatlarini boshqarishda twist burchagini mustaqil geometrik boshqaruv parametri sifatida ko‘ rib chiqish mumkin. Bunda materialning kimyoviy tarkibini o‘ zgartirmagan holda qatlamlarning nisbiy orientatsiyasini o‘ zgartirish orqali elektron zonalar tuzilishi, band gap, elektron holatlar zichligi va elektronlarning fazoviy lokalizatsiyasiga ta’sir ko‘ rsatish imkoniyati mavjud.

Shu bilan birga, real twistronik tizimlarni modellashtirishda faqat ideal twist burchagini hisobga olish yetarli emas. Atomar relaksatsiya, qatlamlararo masofa, stacking konfiguratsiyasi, substrat ta’siri, deformatsiya (strain), dielektrik muhit va nuqsonlar kabi omillar ham elektron zonalar tuzilishiga ta’sir qilishi mumkin. Shu sababli kelgusidagi tadqiqotlarda ideal moiré modelini real eksperimental sharoitlarga yaqinlashtirish, atomar relaksatsiyani hisobga olish va turli kvant-mexanik modellar natijalarini o‘ zaro taqqoslash muhim ilmiy vazifa bo‘ lib qoladi. Moiré tizimlaridagi real strukturaviy rekonstruksiya ham elektron va optik xususiyatlarni sezilarli darajada o‘ zgartirishi mumkinligi zamonaviy tadqiqotlarda ko‘ rsatilgan.

2D yarimo‘ tkazgichlarda twist burchagining elektron zonalar tuzilishiga ta’sirini kvant-mexanik modellashtirish twistronikaning fundamental qonuniyatlarini ochib berish bilan birga, elektron va optoelektron qurilmalar uchun yangi materiallarni loyihalashga nazariy asos yaratadi. Twist burchagi, moiré superpanjara parametrlari, qatlamlararo o‘ zaro ta’sir va elektron zonalar tuzilishi o‘ rtasidagi bog‘ lanishni chuqur o‘ rganish orqali boshqariladigan 2D kvant materiallarini yaratish imkoniyatlari kengayadi. Mazkur yo‘ nalish kelgusida nanoelektronika, optoelektronika, kvant hisoblash, kvant optikasi va boshqa ilg‘ or texnologik sohalarda qo‘ llanilishi mumkin bo‘ lgan yangi funksional materiallarni ishlab chiqish uchun muhim ilmiy asos bo‘ lib xizmat qiladi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Bistritzer, R., & MacDonald, A. H. (2011). Moiré bands in twisted double-layer graphene. Proceedings of the National Academy of Sciences, 108(30), 12233–12237. https://doi.org/10.1073/pnas.1108174108

2. Carr, S., Fang, S., & Kaxiras, E. (2020). Electronic-structure methods for twisted moiré layers. Nature Reviews Materials, 5, 748–763. https://doi.org/10.1038/s41578-020-0214-0

3. Mak, K. F., & Shan, J. (2022). Semiconductor moiré materials. Nature Nanotechnology, 17, 686–695. https://doi.org/10.1038/s41565-022-01165-6

4. Huang, D., Choi, J., Shih, C.-K., & Li, X. (2022). Excitons in semiconductor moiré superlattices. Nature Nanotechnology, 17, 227–238. https://doi.org/10.1038/s41565-021-01068-y

5. Regan, E. C., Wang, D., Paik, E. Y., Zeng, Y., Zhang, L., Zhu, J., MacDonald, A. H., Deng, H., & Wang, F. (2022). Emerging exciton physics in transition metal dichalcogenide heterobilayers. Nature Reviews Materials, 7, 778–795. https://doi.org/10.1038/s41578-022-00440-1

6. Wu, F., Lovorn, T., Tutuc, E., & MacDonald, A. H. (2018). Hubbard model physics in transition metal dichalcogenide moiré bands. Physical Review Letters, 121(2), 026402. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.026402

7. Rivera, P., Yu, H., Seyler, K. L., Wilson, N. P., Yao, W., & Xu, X. (2018). Interlayer valley excitons in heterobilayers of transition metal dichalcogenides. Nature Nanotechnology, 13, 1004–1015.

8. Jiang, Y., Chen, S., Zheng, W., Zheng, B., & Pan, A. (2021). Interlayer exciton formation, relaxation, and transport in TMD van der Waals heterostructures. Light: Science & Applications, 10, 72. https://doi.org/10.1038/s41377-021-00500-1

9. Ciarrocchi, A., Tagarelli, F., Avsar, A., & Kis, A. (2022). Excitonic devices with van der Waals heterostructures: valleytronics meets twistronics. Nature Reviews Materials, 7, 449–464.

10. Kundu, S., Amit, T., Krishnamurthy, H. R., Jain, M., & Refaely-Abramson, S. (2023). Exciton fine structure in twisted transition metal dichalcogenide heterostructures. npj Computational Materials, 9, 186.

11. Mueller, T., & Malic, E. (2018). Exciton physics and device application of two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors. npj 2D Materials and Applications, 2, 29.

12. Tartakovskii, A. (2020). Excitons in 2D heterostructures. Nature Reviews Physics, 2, 8–9.

13. Wang, L. et al. (2019). One-dimensional electrical contact to a two-dimensional material. Science, 363. [2D materiallar va qurilma interfeyslari bo‘ yicha qo‘ shimcha nazariy-amaliy manba sifatida].

14. Bistritzer, R., & MacDonald, A. H. (2011). Moiré butterflies in twisted bilayer graphene. Physical Review B, 84, 035440. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.035440