Oriental Renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences
SJIF 2023 = 6.131 / ASI Factor = 1.7
(E)ISSN:2181-1784
www.oriens.uz
3(6), June, 2023

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ ВЕНТЦЕЛЯ-КРАМЕРСА-БРИЛЛЮЭНА

Р.Расулов,
Х.Рахматуллаев,
М.Маматова

АННОТАЦИЯ

Прогресс современной микроэлектроники в значительной степени определяется изучением свойств систем с неоднородно распределёнными параметрами, развитием методов эффективного теоретического анализа таких систем, разработкой и обеспечением объективными методами контроля технологических процессов, позволяющих создавать полупроводниковые слои с заданными свойствами. В связи с этим ниже рассмотрим общие вопросы распространения электронных волн в среде, свойства которой меняются только вдоль определенного направления. Подход основан на использовании одноэлектронного стационарного уравнения Шредингера для описания процессов упругого рассеяния и туннелирования невзаимодействующих бесспиновых частиц при условии сохранения их полной энергии.

Ключевые слова: *уравнения Шредингера, потенциал, кубическое и биквадратичное приближение, коэффициенты разложения, гармонического осциллятор, эффективная масса электронов, функции Эйри, приближении ВКБ, энергетический спектр.*

ELECTRONIC STATES IN A MULTILAYER SEMICONDUCTOR STRUCTURE IN THE APPROXIMATION WENTZEL-KRAMERS-BRILLOUIN

ABSTRACT

The progress of modern microelectronics is largely determined by the study of the properties of systems with nonuniformly distributed parameters, the development of methods for the effective theoretical analysis of such systems, the development and provision of objective methods for controlling technological processes that make it possible to create semiconductor layers with desired properties. In this regard, below we consider the general issues of the propagation of electron waves in a medium whose properties change only along a certain direction. The approach is based on the use of the one-electron stationary Schrödinger equation to describe the processes of elastic scattering and tunneling of non-interacting spinless particles under the condition that their field is conserved noah energy.

Keywords: *Schredinger equations, potential, cubic and biquadratic approximations, expansion coefficients, harmonic oscillator, electron effective mass, Airy functions, WKB approximations, energy spectrum.*

ВВЕДЕНИЕ

Исследование электронных состояний в вышеупомянутых структурах приводит к расчету одноэлектронных волновых функций стационарного уравнения Шредингера в квазиклассическом приближении при наличии потенциала $U(x)$, который будем считать медленно меняющейся функцией координаты x.

Тогда одномерное уравнение Шредингера запишется как

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi, \qquad (1)$$

где, проводя замену $\psi(x)=\exp\left(iS(x)/h\right)$ и получим уравнение для функции $S(x)$[10]

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS(x)}{dx}\right)^2-\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{d^2S(x)}{dx^2}\right)=E-U(x)\,. \ (2)$$

Считая, что рассматриваемая система по своим свойствам близка к классической, будем искать решение в виде ряда по степеням постоянной Планка, т.е.

$$S(x)=S_0(x)+\frac{\hbar}{i}S_1(x)+\left(\frac{h}{i}\right)^2S_2(x)+\cdots \ (3)$$

Тогда общее решение уравнения (1) имеет вид

$$\psi(x)=\frac{c_1}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(\frac{i}{h}\int|p(x)|dx\right)+\frac{c_2}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(-\frac{i}{h}\int|p(x)|dx\right), \ (4)$$

где $p(x)=[2m(E-U(x))]^{1/2}$, m носителей тока. и E -эфективная масса и энергия.

В классически недоступних областях энергии, т.е. при $E<U(x)$, импульс

носителей тока становится минимым. Тогда в этих областях (4) принимает вид

$$\psi(x)=\frac{c_1}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(\frac{1}{h}\int|p(x)|dx\right)+\frac{c_2}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{h}\int|p(x)|dx\right) \ (5)$$

Отметим, что точность квазиклассического приближения не позволяет учитывать оба слагаемых одновременно, и поэтому в некоторых случаях не учтем экспоненциально малого слагаемого в (4) и (5).

Рассмотрим изолированную классическую точку поворота при $x=a$, вдали от которой квазиклассическое приближение применимо для расчета коэффициента прозрачности потенциального барьера [11]. Поэтому решения

Oriental Renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences
SJIF 2023 = 6.131 / ASI Factor = 1.7
(E)ISSN:2181-1784
www.oriens.uz
3(6), June, 2023

уравнения Шредингера в разрешенных и запрещенных областях могут быть найдены по формулам (4) $-(5)$.

Волновая функция вблизи точки поворота может быть найдена в результате решения уравнения Шредингера, где вблизи точки поворота $(x=a)$ потенциальную энергию $U(x)$ представим в виде

$$U(x)\square U(x=a)+\frac{dU}{dx}|_{x=a}(x-a)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}|_{x=a}(x-a)^2 \ (6a)$$

или

$$u(x)\square U(\sigma=0)+u^r_{\sigma=0}+U''_{\sigma=0}. (6b)$$

Тогда уравнение Шредингера запишется как

$$\frac{d^2\psi}{d\sigma^2}+\frac{1}{E_0}(\sigma\sigma^2)\psi=0,$$

или

$$\frac{d^2\psi}{d\sigma^2}+(\sigma\sigma^2)\psi=0, (7)$$

общее решение которого является произвольная линейная комбинация гипергеометрических функций, т.е.

$$\psi(\sigma)=C_{11}F_1[(\frac{1}{4}-\frac{k_1^2}{16k_2^{3/2}}-\frac{k_0}{4k_2^{1/2}}),\frac{1}{2},\frac{(2k_2\sigma+k_1)^2}{4k_2^{3/2}}]\exp[-\frac{\sigma(2k_2\sigma+k_1)}{2\sqrt{k_2}}]+$$

$$+C_{21}F_1[(\frac{3}{4}-\frac{k_1^2}{16k_2^{3/2}}-\frac{k_0}{4k_2^{1/2}}),\frac{3}{2},\frac{(2k_2\sigma+k_1)^2}{4k_2^{3/2}}](2k_2\sigma+k_1)\exp[-\frac{\sigma(2k_2\sigma+k_1)}{2\sqrt{k_2}}], (8)$$

где $\sigma=\frac{x-a}{a}$ $E_a=\frac{\hbar^2}{2ma^2}$, $k_1=\frac{1}{E_a}U'_{\sigma=0}=\frac{1}{E_a}\frac{\partial U(\sigma)}{\partial\sigma}|_{\sigma=0}$, $k_2=\frac{1}{E_a}U''_{x=a}=\frac{1}{E_a}\frac{\partial^2 U(\sigma)}{\partial\sigma^2}|_{\sigma=0}$,

$k_0^2=\frac{2m}{h^2a^2}(E-U(x=0))$.

В общем случае F_1 $[(\frac{1}{4}-\frac{k_1^2}{16k_2^{3/2}}-\frac{k_0}{4k_2^{1/2}}),\frac{1}{2},\frac{(2k_2\sigma+k_1)^2}{4k_2^{3/2}}]\propto\exp[\frac{(2k_2\sigma+k_1)^2}{4k_2^{3/2}}]$, что соответствует экспоненциально растущей волновой функции. Поэтому для выбора волновой функции, удовлетворяющей условия конечности волновых функций в бесконечности, т.е. удовлетворяющие данного квантово-механического подхода, имеются две альтернативные случаи:

1. $C_1\neq 0,\ C_2=0$ i $\frac{1}{4}-\frac{k_1^2}{16k_2^{3/2}}-\frac{k_0}{4k_2^{1/2}}=-4n$. В этом случае волновая функция принимает вид

$$\psi_{2n}(\sigma)=11F[-n,\frac{1}{2},\frac{(2k_2\sigma+k_1)^2}{4k_2^{3/2}}]\exp[-\frac{\sigma(2k_2\sigma+k_1)}{2\sqrt{k_2}}], (9)$$

а энергетический спектр носителей тока квантован и определяется как $k_0 = (1+16n)k_2^{1/2} - k_1^2$ (10)

Из (10) получим выражение для размерно-квантованного энергетического спектра в виде

$$E = U(x=0) + \frac{h^2}{2m}k_2[(1+16n) - \frac{k_1^2}{4k_2}]^2$$

или

$$E_1 - U(x=0) = U''_{\sigma=0}[(1+16n) - \frac{1}{4E_a}\frac{(U'_{\sigma=0})^2}{U_{\sigma=0}}]^2 \ (11)$$

2. $C_2 \neq 0, \ C_1 = 0$ i $\frac{3}{4} - \frac{k_1^2}{16k_2^{3/2}} - \frac{k_0}{4k_2^{1/2}} = -2(2n+1)$. В этом случае волновая функция принимает вид

$$\psi_{2n+1}(\sigma) ={}_1F_1[-n, \frac{3}{2}, \frac{(2k_2\sigma+k_1)^2}{4k_2^{3/2}}](2k_2\sigma + k_1)\exp[-\frac{\sigma(2k_2\sigma+k_1)}{2\sqrt{k_2}}], \ (12)$$

Далее рассмотрим кубическое и биквадратичное приближение. Тогда кубический и биквадратичный члены в потенциала имеет вид

$$U(x) = \frac{1}{2}ma)^2x^2 + \varepsilon_3(\frac{x}{l})^3 + \varepsilon_4(\frac{x}{l})^4, \quad (13)$$

где $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. ε_3 и ε_4 -коэффициенты разложения $U(x)$ в ряд по x/l.

Решение уравнения Шредингера можно произвести аналогичным образом. При этом оно переходит в уравнение Шредингера для гармонического осциллятора при $\varepsilon_3 = 0$ и $\varepsilon_4 = 0$. Тогда его можно решить с помощью теории возмущения [10]. При этом энергия частиц в потенциале (1) в нулевом приближении равняется энергию гармонического осциллятора:

$$E_n^0 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \qquad (14)$$

а волновая функция в нулевим приближении имеет вид [10]

$$u_n^0(x) = (2^n n!\, l\sqrt{\pi})^1 -/_2 12e^{-/\xi^2}H_n(\xi), \xi = \frac{x}{l}. \ (15)$$

Тогда расчет энергетического спектра электронов по теории возмущения дает следующий результат

$$E(k_\alpha, n) = E(k_\alpha) + \frac{1}{8}\hbar\omega\{(n+\frac{1}{2}) - 30(\frac{\mathcal{E}_1}{\hbar\omega)})^2(n^2+n+\frac{11}{30}) + 6g\frac{\mathcal{E}_1}{\hbar\omega)}(2n^2 + 2n + 1) -$$

$$-g^2(\frac{\varepsilon_1}{\hbar\omega)})^2(34n^3+51n^2+59n+21)\}, \quad (16)$$

где m-эффективная масса электронов, ось Ox выбрана в качестве оси размерного квантования, $g=\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}$, в сферическом приближении в энергетическом спектре $E(k_\alpha)=\frac{\hbar^2}{2\cdot m}(k_y^2+k_Z^2)$. $k_\infty=0(y,z)$. Расчеты показывают, что энергетический спектр электронов в потенциале (1) принимает дискретные значения и крутизна энергетического спектра тем заметна, чем больше $g=\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}$, а также она уменьшается с ростом $\varepsilon_1/\hbar\omega)$ для произвольных значеный n . Если считаем, что $U''_{x=a}=0$ тогда уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}-\xi\psi=0, \quad (17)$$

решение которого можно представить в виде линейной комбинации функций Эйри первого и второго рода

$$\psi(\xi)=A_1Ai(\xi)+B_1Bi(\xi), \quad (18)$$

где $\xi=(x-a)[2m(dU/dx)_a/\hbar)^2]^{1/3}$. Неизвестные величины A_1 и B_1, определяемые из граничных условий рассматриваемой задачи, $Ai(\xi), Bi(\xi)$ – функции Эйри, которые при отрицательных значениях ξ как $Ai(\xi)$, так и $Bi(\xi)$

осциллируются, а при положительных значениях ξ функция $Ai(\xi)$ экспоненциально затухает, а $Bi(\xi)$ экспоненциально растет. Поэтому B дальнейшем, например, для расчета связанных состояний электронов, считаем, что коэффициент $в_1=0$, поскольку волновая функция должна затухать на бесконечности. Для определенности рассмотрим случай, когда разрешенная область находится слева от точки поворота $(\xi=0)$, а запрещенная область - справа. Тогда нас будет интересовать решение, которое экспоненциально затухает при $\xi\to+\infty$ и осциллирует при $\xi\to-\infty$.

Такое решение уравнения Шредингера описывается функцией Эйри первого рода, которая имеет следующие асимптотики, т.е. пр $\xi\to+\infty$

$$\psi(\xi\to\infty)=A_1(1/2)\xi^{-1/4}\times\exp\{-(2/3)\xi^{3/2}\}$$
$$\psi(\xi\to-\infty\rangle=A_1(-\xi\rangle^{-1/4}\sin[(2/3\rangle|(-\xi)^{3/2}+\tau/4] \quad (19)$$

В классически разрешенной области I $(x<a)$ волновая функция может быть представлена в виде двух бегущих волн

$$\psi_I(\xi)=\frac{c_1}{|\xi|^{1/4}}\exp(-\frac{2}{3}i|\xi|^{3/2})+\frac{c_2}{|\xi|^{1/4}}\exp(+\frac{2}{3}i|\xi|^{3/2}) \quad (20)$$

Для того, чтобы это выраженые имело вид стоячей волны и, тем самым, совпадало с асимптотическим выраженем для функции Эйри при $\xi \to -\infty$, необходмо потребовать, например, $C_1 = -Ce^{-i\pi/4}/(2i)$ i $C_2 = Ce^{+i\pi/4}/(2i)$. В этом случае формула (10) принимает следиющий вид

$$\psi_I(\xi) = \frac{c}{|\xi|^{1/4}} \sin\left(\frac{\pi}{4} - \frac{2}{3}\xi^{-3/2}\right) \qquad (21)$$

Таким образом, мы установли, что экспоненциально затухающее решение переходит в осциллирующее решение. В заключение заметим, что полное и строгое решение задачи в квазиклассическом приближении, которое позволит описать волновую функцию для произвольных значений x, теперь сводится к задаче о сшивании точного решения уравнения Шредингера вблизи точки $\xi = 0$. Этот случай требует отдельного рассмотрения.

ЛИТЕРАТУРА (REFERENCES)

1. Mamatova, M. A., Yavkachovich, R. R., Dilshodbek, M., & Forrukh, K. (2022). Relation between the concentration of nonequilibrium electrons and holes in long semiconductor diodes. *European science review*, (5-6), 29-32.

2. Расулов, В. Р., Расулов, Р. Я., Маматова, М. А., & Исомаддинова, У. М. (2022). К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ. *Universum: технические науки*, (10-5 (103)), 24-31.

3. Rustamovich, R. V., Yavkachovich, R. R., Adhamovna, M. M., Qizi, K. M. N., & Dovlatboyevich, M. D. (2022). VOLT-AMPERE CHARACTERISTICS OF A THREE-LAYER SEMICONDUCTOR DIODE OF DOUBLE INJECTION. *European science review*, (5-6), 37-41.

4. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Eshboltaev, I. M. (2022). THEORETICAL INVESTIGATION OF ENERGY STATES IN A MULTILAYER SEMICONDUCTOR STRUCTURE IN THE QUASICLASSICAL APPROXIMATION. *Galaxy International Interdisciplinary Research Journal*, *10*(12), 96-104.

5. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Qosimov, F. (2022, December). Semiclassical theory of electronic states in multilayer semiconductors. Part 1. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 2388, No. 1, p. 012156). IOP Publishing.

6. Маматова, М. А., Исомаддинова, У. М., Кодиров, Н. У. О., & Обидова, М. И. (2022, December). КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ В СФЕРИЧЕСКОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ. In *The 12 th International scientific and practical conference "Eurasian scientific discussions"(December 18-20, 2022) Barca Academy Publishing, Barcelona, Spain. 2022. 542 p.* (p. 226).

7. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Eshboltaev, I. M. (2022). THEORETICAL INVESTIGATION OF ENERGY STATES IN A MULTILAYER SEMICONDUCTOR STRUCTURE IN THE QUASICLASSICAL APPROXIMATION. *Galaxy International Interdisciplinary Research Journal*, *10*(12), 96-104.
8. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Gofurov, S. Z. U. (2022). GENERALIZED MODEL FOR THE ENERGY SPECTRUM OF ELECTRONS IN TUNNEL-COUPLED SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS. *EPRA International Journal of Multidisciplinary Research (IJMR)*, *8*(12), 1-5.
9. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Qosimov, F. (2022, December). Semiclassical theory of electronic states in multilayer semiconductors. Part 2. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 2388, No. 1, p. 012158). IOP Publishing.
10. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Eshboltaev, I. M. (2022). THEORETICAL INVESTIGATION OF ENERGY STATES IN A MULTILAYER SEMICONDUCTOR STRUCTURE IN THE QUASICLASSICAL APPROXIMATION. *Galaxy International Interdisciplinary Research Journal*, *10*(12), 96-104.
11. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., Mamatova, M. A., & Gofurov, S. Z. U. (2022). GENERALIZED MODEL FOR THE ENERGY SPECTRUM OF ELECTRONS IN TUNNEL-COUPLED SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS. *EPRA International Journal of Multidisciplinary Research (IJMR)*, *8*(12), 1-5.
12. Расулов, Р. Я., Маматова, М. А., Хасанович, Р., & Муминов, И. (2014). О кинетическом уравнении для дырок в размерно-квантованной яме полупроводника вырожденной валентной зоной. *Austrian Journal of Technical and Natural Sciences*, (9-10), 150-153.
13. Rasulov, R. Y., Karimov, I. N., Mamatova, M., Omonova, H., & Sultanov, R. R. European Science Review, Issue 1-2-1/2019.
14. Маматова, М. А., & Расулов, Р. Я. (2019). К ТЕОРИИ ВОЛЬТ-АМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРЕХСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В ДИОДНОМ ВКЛЮЧЕНИИ. In *WORLD SCIENCE: PROBLEMS AND INNOVATIONS* (pp. 13-17).
15. Rasulov, V. R., Rasulov, R. Y., & Adhamovna, M. M. (2022). ELECTRONIC PROPERTIES OF A SEMICONDUCTOR TWO-BARRIER STRUCTURE. *EPRA International Journal of Multidisciplinary Research (IJMR)*, *8*(5), 58-62.
16. Расулов, В. Р., Расулов, Р. Я., Маматова, М. А., Исомаддинова, У. М., & Касимов, Ф. (2022). КЛАССИФИКАЦИЯ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДВУХФОТОННЫХ МЕЖЗОННЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛАХ. УЧЕТ ВКЛАДА ЭФФЕКТА КОГЕРЕНТНОГО НАСЫЩЕНИЯ. EDITORIAL BOARD, 262.