

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

ФАРҶОНА ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

**FarDU.
ILMIY
XABARLAR-**

1995 йилдан нашр этилади
Йилда 6 марта чиқади

1-2020

**НАУЧНЫЙ
ВЕСТНИК.
ФерГУ**

Издаётся с 1995 года
Выходит 6 раз в год

Қ.Бозоров	
Андижоннинг суғорилиш тарихига доир мулоҳазалар	81
У.Усаров	
XIX асрнинг иккинчи ярми – XX аср бошларида Самарқанд вилояти қишлоқ хўжалиги ва ер-сув муносабатлари.....	85
Б.Шодмонов	
Ўзбекистон ёшларга оид давлат сиёсати ва унинг ҳуқуқий асослари ишлаб чиқишининг тарихий босқичлари.....	90

АДАБИЁТШУНОСЛИК

А.Акбаров	
“Кечиккан марҳамат” нинг бадиий ифодаси.....	98
Г.Қосимова	
Мемуар асарда муаллиф услуби ва ифода шакли	102
Б.Абдурахмонова	
Огаҳийнинг “Устина” ғазали матни устида ишлаш	105
В.Қаюмов, Б.Деҳқонов	
У.Ҳамдамнинг “Кўнглимдаги дарё” хикоясида дарё образи.....	110
О.Солиева	
Нишотий мухаммасларининг матний-қиёсий таҳлили (II қисм)	114

ТИЛШУНОСЛИК

Р.Сайфуллаева, П.Бобокалонов, Н.Ҳаятова	
Хорижий тилни ўргатишда психонейролингвистик ҳолат ва каноник модели гапларнинг ўрни	119
З.Алимова	
Ўзбек тилига форс-тожик тилидан ўзлашган префикс ва суффикслар хусусида.....	124

ПЕДАГОГИКА, ПСИХОЛОГИЯ

М.Ахмедова	
Тиббиёт олий ўқув юртлари талабаларида чет тилида касбий-коммуникатив компетенцияни шакллантириш масалалари	128
М.Шокирова, Н.Абдуллаева	
Талабаларнинг чет тилида коммуникатив компетенциясини ривожлантиришнинг фаолиятга асосланган ёндашуви.....	132
У.Хайдарова	
Талабаларнинг ёзма ишларига билдирилган фикр-мулоҳазаларнинг аҳамияти	136

ИЛМИЙ АХБОРОТ

Г.Тиллабаева	
Ўнг томони номаълум бўлган иккинчи тартибли чизикли оддий дифференциал тенгламалар учун чегаравий масала	140
В.Расулов, Р.Расулов, Б.Ахмедов, А.Абдухоликов, У.Раимжонова	
Яримўтказгичларда эффектив гамильтонианнинг нодиagonal матрицавий элементлари ҳақида	143
Х.Муйдинов	
Қорақалпоғистон шароитида қорамол тери ости бўкаларининг турлари ва тарқалиши	147
Б.Усманов, Ш.Умурзакова	
Буғдой навлари сифатининг физик-кимёвий кўрсаткичлари	150
Ф.Юлдашев, Д.Обидова	
Ёшлар камолотида инсонпарварлик ва бағрикенглик тамойилларини юксалтиришнинг муҳим жиҳатлари	153
А.Мамаджанов	
Конституция – давлат ҳуқуқий тизимининг асоси	156
М.Шамсиева	
Ижтимоий ҳимоя инсон тараққиёти индексини белгиловчи асосий мезон сифатида	159

УДК:621. 315. 592

ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАРДА ЭФФЕКТИВ ГАМИЛЬТОНИАННИНГ НОДИАГОНАЛ МАТРИЦАВИЙ ЭЛЕМЕНТЛАРИ ҲАҚИДА

О НЕДИАГОНАЛЬНЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

NONDIAGONAL MATRIX ELEMENTS OF THE EFFECTIVE HAMILTONIAN IN A SEMICONDUCTOR

В.Расулов, Р.Расулов, Б.Ахмедов, А.Абдухоликов, У.Раимжонова

Аннотация.

Яримўтказгичлардаги ток ташувчилар эффектив гамильтонианнинг нодиagonal матрицавий элементлари зонавий назариянинг ўтказувчанлик зонаси, валент зона ва спин-орбитал зоналар яқинлашишида ҳисобланган.

Аннотация

Рассчитаны недиагональные матричные элементы эффективного гамильтониана носителей тока как в приближении зонной теории, где рассматриваются зона проводимости, валентная зона, состоящая из подзон легких и тяжелых дырок и спин-отщепленная зона.

Annotation

The matrix elements of the effective carrier Hamiltonian are calculated as in the Kane approximation, where the conduction band, the valence band consisting of light and heavy hole subbands, and the spin-split band, as well as in the Luttinger-Kohn model, are considered.

Таянч сўз ва иборалар: матрицавий элемент, эффектив гамильтониан, ток ташувчилар, тўлқин функция.

Ключевые слова и выражения: матричный элемент, эффективный гамильтониан, носители тока, волновая функция.

Keywords and expressions: matrix element, effective Hamiltonian, current carriers, wave function.

Как указано в первой части данной статьи [1], многие физические параметры кристаллического потенциала зависят от зонной структуры полупроводника [2-10]. При этом, обычно, в зонной теории считают, что кристаллический периодический потенциал всегда является четной функцией координат. Однако, в отдельных случаях, например, в полупроводнике, где имеется гетеропереход, периодический потенциал кристалла наряду с симметричной частью, может иметь и асимметричную часть. Этот случай требует отдельного анализа матричных элементов эффективного гамильтониана носителей тока в приближении, где рассматриваются зона проводимости, валентная зона, состоящая из подзон легких и тяжелых дырок и спин-отщепленная зона [7, 8].

Следуя по [1] имеем следующее уравнение Шредингера

$$\{H_0 + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma}\} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1)$$

Здесь и ниже обозначения соответствуют обозначениям работы [1].

Если решение (1) ищем в виде функции Блоха $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$, тогда получим уравнение для Блоховской амплитуды $u_{n\vec{k}}(r)$ в виде

$$\{H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k}\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma}\} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E' u_{n\vec{k}}(r) \quad (2)$$

где $E' = E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. Последний член в (2) описывает спин-орбитальное взаимодействие, зависящее от волнового вектора носителей тока. Таким образом, эффективный гамильтониан,

В.Расулов – ФерГУ, доктор философии (PhD) по физике и математике, доцент.

Р.Расулов – ФерГУ, доктор физико-математических наук, профессор.

Б.Ахмедов – ФерГУ, докторант кафедры физики

А.Абдухоликов – ФерГУ, магистр физики (радиофизика).

У.Раимжонова – ФерГУ, студент методик преподавания физики и астрономии.

действующий на периодическую функцию $u_{n\vec{k}}(r)$, выражается в виде:

$$H = H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad (3)$$

Здесь $H_1 = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \vec{p}$ и $H_2 = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma}$ появляются из-за перехода от Блоховской функции к функции $u_{n\vec{k}}(r)$, $H_3 = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma}$ слагаемое описывают зависимого спин-орбитального взаимодействия. Блоховская амплитуда $u_{n\vec{k}}(r)$ для электронов в зоне проводимости можно представить как: $|iS \uparrow\rangle, |iS \downarrow\rangle$, а для дырок в валентной зоне- $|X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$ с соответствующими собственными энергиями E_s и E_p , которые определены как $H_0|S\rangle = E_c|S\rangle, H_0|X\rangle = E_p|X\rangle, H_0|Y\rangle = E_p|Y\rangle, H_0|Z\rangle = E_p|Z\rangle$, где (см., например, [8])

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, |Z\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}, |X \pm iY\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x \pm iy}{r}, \quad (4)$$

Ниже базисные функции носителей тока как в зоне проводимости, так и в валентной зоне представим, как в работе [1] (см. формулы (8,9)). На основе этих функций определим недиагональные матричные элементы гамильтониана (3). Это требует рассчитать матричные элементы каждого слагаемого (3) по отдельности, где в дальнейших расчетах учтем, что $\iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{x^{2m+1} \cdot y^l \cdot z^\mu}{r^n} d\vec{r} = \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{x^m \cdot y^{2l+1} \cdot z^\mu}{r^n} d\vec{r} = \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{x^m \cdot y^l \cdot z^{2\mu+1}}{r^n} d\vec{r} = 0$, где $d\vec{r} = dx dy dz$, m, l, μ - целые числа. Тогда матричные элементы операторов

$$H_1 = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \vec{p}, H_2 = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma}, H_3 = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad (5)$$

определяются со следующими соотношениями: из-за ортогональности спиноров недиагональные матричные элементы $\langle 1|H_0|2\rangle, \langle 1|H_1|2\rangle$ равняется нулю, а выражение для недиагональных матричных элементов $\langle 1|H_2|2\rangle$ и $\langle 1|H_3|2\rangle$ приведены ниже:

$$\begin{aligned} \langle 1|H_2|2\rangle &= \langle 1|H_2|2\rangle = \langle -iS \downarrow | H_2 | \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \rangle = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \{J_{21} - iJ_{22}\}, \\ \langle 1|H_3|2\rangle &= \langle 1|H_3|2\rangle = \langle -iS \downarrow | H_3 | \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \rangle = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (J_{31} - iJ_{32}), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} J_{21} &= J_{21}^{(1)} - iJ_{21}^{(2)}, J_{21}^{(1)} = k_z \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} \frac{x-iy}{r} dx dy dz, \\ J_{21}^{(2)} &= k_y \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z} \frac{x-iy}{r} dx dy dz, \\ J_{22} &= J_{22}^{(1)} - iJ_{22}^{(2)}, J_{22}^{(1)} = k_x \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z} \frac{x-iy}{r} dx dy dz, \\ J_{22}^{(2)} &= k_z \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial x} \frac{x-iy}{r} \frac{x-iy}{r} dx dy dz; \\ J_{31} &= \langle S | [\vec{\nabla} V \times \vec{p}]_x | \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \rangle = J_{32}^{(1)} - J_{31}^{(2)}, \\ J_{31}^{(1)} &= \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} \right\} (-1) \frac{z}{r} \frac{x-iy}{r^2} dx dy dz, \\ J_{31}^{(2)} &= \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z} \right\} \frac{1}{r^3} \{-i(x^2 + z^2) - yx\} dx dy dz; \\ J_{32} &= \langle S | [\vec{\nabla} V \times \vec{p}]_y | \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \rangle = J_{32}^{(1)} - J_{32}^{(2)}, \\ J_{32}^{(1)} &= \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z} \right\} \frac{1}{r^3} \{y^2 + z^2 - iyx\} dx dy dz, \end{aligned}$$

$$J_{32}^{(2)} = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial x} \right\} (-1) \frac{z}{r} \frac{x - iy}{r^2} dx dy dz,$$

откуда видно, что ненулевые значения этих матричных элементов определяются физической природой, т.е. зависимостью от координаты кристаллического потенциала: $V(\vec{r}) = V_{ass}(\vec{r}) + V_{sim}(\vec{r})$.

Теперь анализируем функций J_{lm} : а) J_{21} состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$; б) J_{22} состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$; в) $J_{21}^{(1)}$ от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$; д) $J_{21}^{(2)}$ и $J_{22}^{(1)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$; е) $J_{22}^{(2)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$; ф) $J_{31}^{(1)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$; ж) $J_{31}^{(2)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$; з) $J_{32}^{(1)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$; к) $J_{32}^{(2)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$.

Аналогичным образом получим выражения для следующих матричных элементов:

$$(H_0) = \langle 1|H|3 \rangle = \langle -iS \downarrow |H|Z \downarrow \rangle = 0, \quad (H_1)_{13} = \langle -iS \downarrow |H_1|Z \downarrow \rangle = -i \langle S | \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \vec{p} | Z \rangle = k_z \wp_z, \quad \text{где } \wp_z = -\frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{m_0 4\pi} \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 + y^2}{r^3} dx dy dz.$$

$$(H_2)_{13} = \langle -iS \downarrow |H_2|Z \downarrow \rangle = \langle -iS \downarrow | \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma} | Z \downarrow \rangle =$$

$$= i \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial V}{\partial x} k_y - \frac{\partial V}{\partial y} k_x \right) \frac{z}{r} dx dy dz,$$

Из последнего видно, что первое слагаемое отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$.

$$(H_3)_{13} = \langle -iS \downarrow |H_3|Z \downarrow \rangle = -(-i) \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle S | [\vec{\nabla} V \times \vec{p}]_z | Z \rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{4m_0^2 c^2 4\pi} \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{r^3} \left\{ yz \frac{\partial V}{\partial x} - xz \frac{\partial V}{\partial y} \right\} dx dy dz$$

откуда видно, что этот матричный элемент отличен от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$

Таким образом, показали, что при учете асимметричной части кристаллического потенциала в полупроводниках получаются дополнительные слагаемые в недиагональных матричных элементах эффективного гамильтониана. Если считать, что кристаллический потенциал не имеет асимметричной части, тогда все выражения, полученные выше и связанные с $V_{asim}(x, y, z)$, обращаются в ноль автоматически.

Литература:

1. R. Ya. Rasulov, B.B.Akhmedov, M.B.Ruzialiev, A.Abduxolikov, U.Rayimjonova. Diagonal matrix elements of the effective hamiltonian in a semiconductor (taking into account spin-orbit interaction)/ European Science Review. 2020 (accepted for print).
2. Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics. John Wiley and Sons, Inc. All. Rights reserved. 2005. -675 p.

3. J. M. Ziman. Principles of the Theory of Solids. Cambridge University Press, 1972 - 435 p.
4. Mohammad Abdul Wahab Solid State Physics: Structure and Properties of Materials Alpha Science International, -2005. -596 p. 1842652184, 9781842652183
5. Neil W. Ashcroft, Mermin Ashcroft, Dan Wei, N. David Mermin. Solid State Physic. CENGAGE Learning Asia, - 2016 - 1332 p.
6. Cardona Yu Peter, Cardona Manuel. Fundamentals of Semiconductor Physics. Per. from English I.I. Reshina. Ed. B.P. Zakharcheni. - 3rd ed., Rev. and add. -M.: Fizmatlit, -2002. -560 s. <http://www.twirpx.com/file/221809/>
7. G. L. Bir, G. E. Pikus. Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors. Wiley, 1974 - 484 p. ISBN 0470073217, 9780470073216
8. E.L.Ivchenko, R.Ya.Rasulov. Symmetry and real band structure of half-conductors. -Tashkent. -Fan. -1989. – 126 p.
9. Е.Л.Ивченко, Р.Я. Расулов. О зонной структуре и поглощения поляризованного излучения в алькогенидах свинца. Научно-технический журнал ФерПИ.. 2015. Т.19. №4. С. 9-15.
10. V.R.Rasulov, R.Ya.Rasulov. Dimensional duantization in GaP. Scientific technical journal of FerPI. 2018. Vol.22. Issue 3. P.15-20.
11. L. D. Landau E. M. Lifshitz. Quantum Mechanics. 3rd edition. Non-Relativistic Theory. Pergamon. -1977. -688 p.