

**ELEKTRONLARNING ENERGIYA SPEKTRINI KRONING VA PENNI USULI
YORDAMIDA HISOBLASH****РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА
КРОНИНГА-ПЕННИ****CALCULATION OF THE ENERGY SPECTRUM OF ELECTRONS USING THE KRONIG-
PENNEY METHOD****Rasulov Voxob Rustamovich¹**¹Farg'ona davlat universiteti, fizika kafedrasida dotsenti**Axmedov Baxodir Baxromovich²**²Farg'ona davlat universiteti, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD)**Muminov Islomjon Arabboyevich³**³Farg'ona davlat universiteti, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD)**Annotatsiya**

Ushbu maqolada kristallardagi elektronlarning davriy potensial maydonda harakati Shryodinger tenglamasi yordamida tahlil qilingan. Elektronlarning energiya spektrini aniqlash uchun Kroning va Penning metodidan foydalanilgan. Bu metod bo'yicha kristall panjaradagi atomlar to'g'ri burchakli potensial chuqur va baryerlar bilan ifodalanadi. Elektronlar faqat ruxsat etilgan energetik zonalarda mavjud bo'lib, taqiqlangan zonalar orqali o'ta olmaydi. Shuningdek, energetik zonalar va taqiqlangan zonalar orasidagi bog'lanishlar ko'rib chiqilgan.

Аннотация

В данной статье анализируется движение электронов в кристаллах в периодическом потенциале с помощью уравнения Шрёдингера. Для определения энергетического спектра электронов используется метод Кронига и Пенни. В соответствии с этим методом, атомы в кристаллической решетке представлены прямоугольными потенциальными ямами и барьерами. Электроны могут существовать только в разрешенных энергетических зонах и не могут проходить через запрещенные зоны. Также рассмотрены связи между энергетическими зонами и запрещенными зонами.

Abstract

In this article, the motion of electrons in crystals in a periodic potential field is analyzed using the Schrödinger equation. The Kronig-Penney method is used to determine the energy spectrum of electrons. According to this method, the atoms in the crystal lattice are represented by rectangular potential wells and barriers. Electrons exist only in allowed energy bands and cannot pass through forbidden bands. Additionally, the relationships between energy bands and forbidden bands are examined.

Kalit so'zlar: kristall, davriy potensial maydon, energetik zonalar, taqiqlangan zonalar, elektron energiyasi, potensial chuqur, potensial baryer.

Ключевые слова: кристалл, периодический потенциальный поле, энергетические зоны, запрещенные зоны, энергия электронов, потенциальная яма, потенциальный барьер.

Key words: crystal, periodic potential field, energy bands, forbidden bands, electron energy, potential well, potential barrier.

KIRISH

Kronig-Penning modeli kvant mexikasining muhim yondashuvlaridan biri bo'lib, u kristall panjaradagi elektronlarning xatti-harakatini tushunishga yordam beradi. Ushbu modelda kristall panjaradagi davriy potensial to'g'ri burchakli potensial chuqurlar va baryerlar bilan idealizatsiyalanadi. Bu shuni anglatadiki, har bir atom o'z atrofida potensial chuqur hosil qiladi, elektronlar esa bu chuqurlarda turli energiya darajalarida mavjud bo'lishi mumkin.

Kronig-Penning modeli orqali elektronlarning energiya spektrini o'rganish uchun davriy potensialning matematik tavsifi kiritiladi. Bu modelda elektronlar uchun energetik zonalarni va

energiya spektrlarini aniqlash mumkin. Taqiqlangan zonalar energiya oralig'i bo'lib, unda elektronlar mavjud bo'lishi mumkin emas. Bu esa materialning elektr o'tkazuvchanligini aniqlashda muhimdir..

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

Elektronlar ruxsat etilgan energetik zonalarda mavjud bo'lganligi sababli, ular ushbu zonalar orqali harakatlanishi mumkin, lekin taqiqlangan zonalar orqali o'ta olmaydi[1]. Taqiqlangan zonalar bu energetik darajalar to'plamidirki, bu darajalarda elektronlar mavjud bo'la olmaydi. Bu hodisa elektronlarning energetik tarmoqlanishi va kristall panjaradagi kvant mexanikasi ta'siri natijasida yuzaga keladi.

Elektronlarning harakati Blox teoremasi yordamida hisoblanadi, ya'ni ularning to'lqin funksiyalari kristalning davriyligini hisobga olgan holda yoziladi. Kronig-Penni modelida elektronlarning potensial chuqurliklardagi energiya holatlari to'lqin funksiyalari orqali ifodalanadi va bu funksiyalarning fazoviy va energetik xossalari aniqlanadi.

Bundan tashqari, maqolada energetik zonalar va taqiqlangan zonalar orasidagi bog'lanishlar ham batafsil ko'rib chiqilgan[2]. Energetik zonalar va taqiqlangan zonalar orasidagi bog'lanishlar elektronlarning harakati va ularning kristall ichidagi xatti-harakatiga katta ta'sir ko'rsatadi. Bu bog'lanishlar elektronlarning turli tashqi omillar, masalan, elektr va magnit maydonlar ta'siri ostida qanday xatti-harakat qilishini tushunishga yordam beradi[3].

NATIJA VA MUHOKAMA

Kronig-Penni modelining yana bir muhim jihati shundaki, u kristall panjaradagi elektronlarning energiya spektrini aniqlashda qo'llaniladi. Ushbu spektr elektronlarning kvant holatlari va ularning energiya darajalarini tushunishga imkon beradi. Bu esa o'z navbatida, yarimo'tkazgichlar va boshqa qattiq jismlar fizikasi bo'yicha tadqiqotlar uchun muhim ahamiyatga ega.

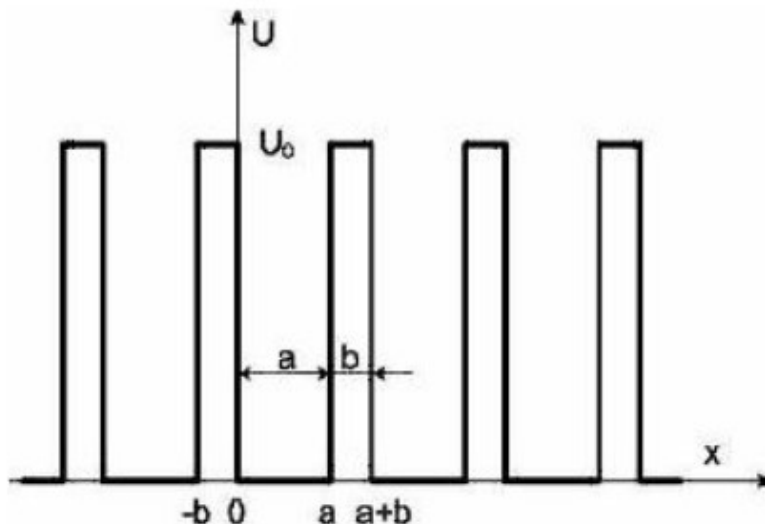
Kristallardagi elektronlar deyarli erkin elektronlar bo'lib, ular davriy potensial maydonda xarakat qiladi, deb qaraylik. U xolda qattiq jismlardagi elektronlarning xarakati Shryodinger tenglamasi orqali ifodalanadi. Bir o'lchovli fazoda bu tenglama quyidagicha yoziladi:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(\varepsilon - U)\psi = 0 \quad (1)$$

bunda ψ – elektronning kristallardagi to'lqin funksiyasi, ε – elektronlar energiyasi, U – elektronlarning davriy maydonda olgan potensial energiyasi. Bu tenglamani umumiy xolda integrallash mumkin emas. Shuning uchun soddalashtirilgan usul bilan yechamiz.

Bizning asosiy maqsadimiz elektron energiyasining xususiy qiymatini aniqlashdan iboratdir. Buning uchun kristallardagi xar bir atom, Kronig va Penni metodiga asosan kengligi a bo'lgan to'g'ri burchak potensial chuqurni xosil qiladi deb qarab, elektronning shu chuqurlikda potensial energiyasi $U = 0$ deb olamiz. Atomlar esa bir-birlari bilan kengligi b bo'lgan to'g'ri burchakli potensial baryer U_0 bilan ajralgan, deb qaraymiz (1-rasm). U xolda (1) tenglama potensial baryer uchun

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{8\pi^2m}{h^2}(U_0 - \varepsilon)\psi = 0 \quad (2)$$



1- rasm. To'g'ri burchakli potensial to'siq (baryer)

ko'rinishni, potensial chuqurlik uchun

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} \varepsilon\psi = 0 \tag{3}$$

ko'rinishni oladi. (2) va (3) tenglamalarni quyidagi sodda shaklga keltirib yozamiz:

$$\psi_1'' - x^2\psi_1 = 0, \text{ bunda } x = \sqrt{\frac{8\pi^2m}{h^2} (U_0 - \varepsilon)}$$

$$\psi_2'' + k^2\psi_2 = 0, \text{ bunda } k = \sqrt{\frac{8\pi^2m}{h^2} \varepsilon} \tag{3'}$$

bu tenglamalarning yechimini quyidagi ko'rinishda izlaymiz:

$$\psi_1(x) = A_1 \text{sh } kx + B_1 \text{ch } kx; \quad -b \leq x \leq 0,$$

$$\psi_2(x) = A_2 \sin kx + B_2 \cos kx; \quad 0 \leq x \leq a$$

$$\psi_3(x) = A_3 \text{sh } kx + B_3 \text{ch } kx; \quad a \leq x \leq b$$

bunda A_1, A_2, A_3, B_1, B_2 va B_3 lar o'zgarmas sonlar. Bularni aniqlash uchun to'lqin funksiyaning uzluksizlik shartidan foydalanamiz:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0); & \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \\ \psi_2(a) &= \psi_3(a); & \psi_2'(a) &= \psi_3'(a) \end{aligned} \tag{4}$$

Kristallarda atomlar tartibli joylashgan bo'lganligi sababli, elektronlarning kristall panjaradagi to'lqin funksiyasi davriy bo'lib, davri panjaraning davriga teng bo'ladi. Shuning uchun elektronlarning kristall panjaraning davriga teng bo'lgan masofadagi nuqtalarda bo'lish extimolliklari bir-birlariga teng bo'ladi, ya'ni

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(x - nc)|^2$$

yoki xususiy xolda $|\psi_3(x)|^2 = |\psi_1(x - c)|^2$ bo'ladi. Bundan ko'rinadiki, $\psi_3(x)$ $a \leq x \leq c$ intervalda $-b \leq x \leq 0$ intervaldagi $\psi_1(x)$ funksiyadan ko'paytuvchi $e^{i\varphi}$ bilan farqlanishi mumkin, ya'ni

$$\psi_3(x) = e^{i\varphi} [A_1 \text{sh } x(x - c) + B_1 \text{ch } x(x - c)]. \tag{5}$$

Chegaraviy shartlar (4) va (5) dan foydalansak, A_1, A_2, B_1 va B_2 lar uchun quyidagi tenglamalar sistemasini olamiz:

$$\begin{cases} B_1 - B_2 = 0, \\ \times A_1 - kA_2 = 0, \\ \times A_1 e^{i\varphi} \text{ch } \times b - B_1 \times e^{i\varphi} \text{sh } \times b - A_2 k \cos ka + B_2 k \sin ka = 0 \\ -A_1 e^{i\varphi} \text{sh } \times b + B_1 e^{i\varphi} \text{ch } \times b - A_2 \sin ka - B_2 k \cos ka = 0 \end{cases} \tag{6}$$

Biz bunda $c = a + b$ dan foydalandik. Bu tenglamalar sistemasi noldan farqli yechimga ega bo'lishi uchun ulardan tuzilgan determinant nolga teng bo'lishi kerak, ya'ni

$$\Delta = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 \\ x & 0 & -k & 0 \\ -e^{i\varphi} \operatorname{sh}\chi b & e^{i\varphi} \operatorname{ch}\chi k & -\sin ka & -\cos ka \\ xe^{i\varphi} \operatorname{ch}\chi k & -xe^{i\varphi} \operatorname{sh}\chi b & -k \cos ka & k \sin ka \end{vmatrix} = 0.$$

Determinantni xisoblab chiqsak,

$$\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sh}\chi b \sin ka + \operatorname{ch}\chi b \cos ka = \cos \varphi \quad (7)$$

tenglikni olamiz. Bu tenglik χ, k va φ orasidagi bog'lanishni beradi, ya'ni elektronning kristalldagi energiyasi ε bilan φ orasidagi munosabatni ko'rsatadi. Agar biz (7) ifodani ε ga nisbatan yechsak, elektronlarning spektrini aniqlagan bo'lamiz. ε bizga ma'lum bo'lsa φ ni topa olamiz. Buning uchun (7) ni soddalashtiraylik. $U_0 \rightarrow \infty; b \rightarrow 0$ deb $U_0 b \rightarrow \text{const}$ qilib olamiz. Boshqacha qilib aytganda, potensial baryerning balandligi cheksizga intiladi, lekin uning yuzasi o'zgarmay qoladi deb qaraymiz. U xolda limitga o'tsak:

$$\lim_{\substack{U_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sh}\chi b = \frac{4\pi^2 m}{h^2 k} U_0 b \quad (8)$$

$$\lim_{b \rightarrow 0} \operatorname{ch} \chi b = 1$$

(7) va (8) ifodalardan

$$\frac{P \sin ka}{ka} + \cos ka = \cos k'a \quad (9)$$

ifodani olamiz. Bunda

$$P = \frac{4\pi^2 m U_0 b a}{h^2}$$

(9) tenglik ε ga nisbatan algebraik yechimga ega emas. Shuning uchun bu ifodani grafik usulda yechamiz. Ordinata o'qiga

$$\frac{P \sin ka}{ka} + \cos ka$$

ni, absissa o'qiga ka qo'ysak, 2-rasmda ko'rsatilgan grafikni olamiz. (9) tenglikning o'ng tomonidagi $\cos k'a$ faqat $+1 \geq \cos k'a \geq -1$ qiymatlarinigina qabul qilganligi sababli, u kuchga ega bo'lishligi uchun tenglikning chap tomonidagi xadlar

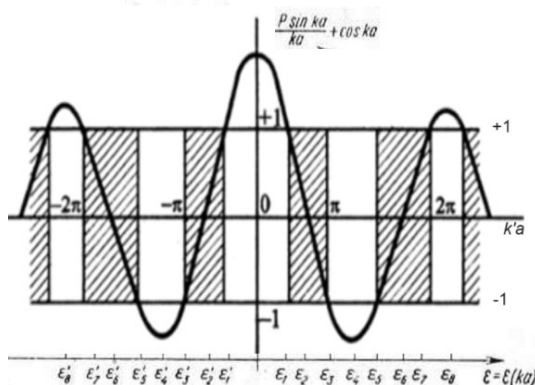
$$P \frac{\sin ka}{ka} + \cos ka$$

xam $+1$ va -1 orasidagi qiymatlarni qabul qilishi kerak. $P \frac{\sin ka}{ka} + \cos ka$ ning absolyut qiymati $|\pm 1|$ dan katta bo'lishi xam mumkin, u xolda (9) tenglik kuchga ega bo'lmaydi.

Kristalldagi elektronlarning energiyasi k orqali aniqlanganligi uchun ular ixtiyoriy energiya qiymatini qabul qilmasdan (9) tenglik kuchga ega bo'ladigan k ning qiymatiga mos kelgan energiyalarni qabul qilishi mumkin. 2-rasmda (9) tenglik kuchga ega bo'ladigan ka qiymatlari shtrixlar bilan ajratilgan. Ularga mos kelgan energiyalar:

$$\Delta \varepsilon'_1 = \varepsilon'_1 - \varepsilon'_2, \quad \Delta \varepsilon'_2 = \varepsilon'_2 - \varepsilon'_{21}, \dots$$

$$\Delta \varepsilon_1 = \varepsilon_2 - \varepsilon_1, \quad \Delta \varepsilon_2 = \varepsilon_4 - \varepsilon_3, \dots$$



2-rasm. Kristall panjaradagi mumkin bo'lgan energetik xolatlar.

oraliqdagi qiymatlarni qabul qiladi. Bu oraliqlardagi energiya qiymatlari elektronlar uchun ruxsat etilgan qiymatlar bo'lib hisoblanadi. Shuningdek,

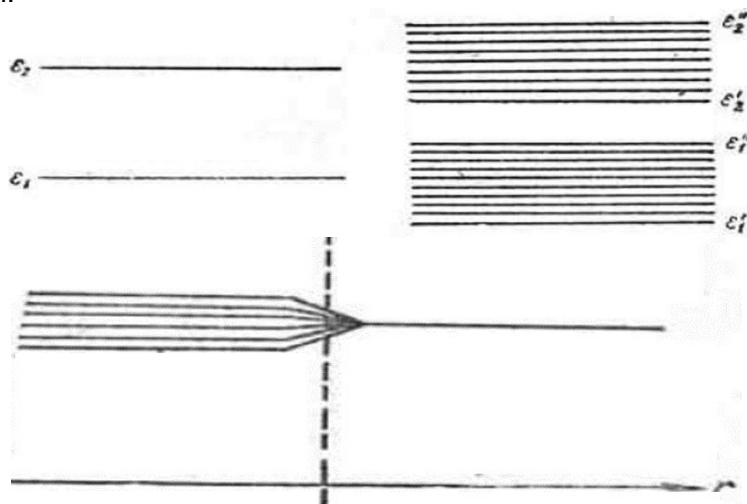
$$\dots, \epsilon_1 - \epsilon'_1, \epsilon_2 - \epsilon'_2, \dots, \epsilon_3 - \epsilon_2, \epsilon_5 - \epsilon_4, \dots$$

oraliqlardagi energiya qiymatlari elektronlar uchun man qilingan qiymatlardir. Ya'ni bu oraliqdagi energiyalarni elektronlar qabul qila olmaydi. Yuqorida aytilganlardan ko'rinib turibdiki, kristallarda elektronlarning energetik satxlari, energetik zonalarga ajralar ekan. Bu energetik zonalar esa taqiqlangan zonalar bilan ajratilgan bo'lar ekan. Elektronlar energiyasining xususiy qiymatlarini (9) ifodadan topsak, ularning xususiy funksiyalarini ham aniqlay olamiz.

(9) da $P = \infty$ bo'lsa, $\sin ka = 0$ bo'ladi. Bundan $k = n \frac{\pi}{a}$ qiymatlarni qabul qila oladi, yoki

$$E = \frac{n^2 h^2}{8a^2 m}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

bo'lib izolyatsiyalangan atomdagi elektronlarning spektrini olamiz. P - chekli aniq qiymatni qabul qilsa, yuqorida ko'rilganidek energetik zonalarini olamiz (3- rasm). Elektronlar bitta energetik zonadan ikkinchi energetik zonaga o'tishi uchun kamida taqiqlangan zona kengligiga teng bo'lgan energiyani yutishi yoki chiqarishi kerak, aks xolda, elektron zonadan zonaga o'ta olmaydi. Ruxsat etilgan zonada elektron bir energetik satxidan ikkinchi energetik satxga energiyasi $10^{-22} eV$ ga o'zgarishi bilan o'ta oladi.



3 - rasm. Kristallarda energetik zonalarning xosil bo'lishi.

XULOSA

Ushbu maqolada kristallardagi elektronlarning davriy potensial maydonda harakati va energetik xususiyatlari tahlil qilindi. Kronig-Penni modeli yordamida kristall panjaradagi atomlar to'g'ri burchakli potensial chuqurlar va baryerlar bilan ifodalangan. Bu yondashuv orqali elektronlarning energetik spektri va zonalararo bog'lanishlari batafsil o'rganildi. Tadqiqot natijasida elektronlarning faqat ruxsat etilgan energetik zonalarda mavjud bo'lishi va taqiqlangan zonalar orqali o'ta olmasligi aniqlandi. Bu hodisa elektronlarning kvant xususiyatlari va kristall panjaradagi

davriy potensial ta'siri natijasida yuzaga keladi. Elektronlar ruxsat etilgan zonalarda erkin harakatlana oladi, lekin zonalararo o'tish uchun qo'shimcha energiya talab qilinadi. Elektron energiyasining xususiy qiymatlari va ularning to'lqin funksiyalari Kronig-Penni modeli yordamida hisoblab chiqildi. Elektronlarning energetik satxlari va ularning taqiqlangan zonalar bilan ajralishi kristall ichidagi kvant mexanikasi hodisalari natijasida sodir bo'ladi. Kristall panjaradagi elektronlarning harakati va ularning energetik zonalarga ajralishi kvant mexanikasi qonuniyatlariga asoslanadi. Bu tadqiqot yarimo'tkazgichlar va boshqa qattiq jismlar fizikasi bo'yicha tadqiqotlar uchun muhim ahamiyatga ega. Elektronlarning energetik spektrini aniqlash va ularning xatti-harakatini tushunish, kelajakdagi yarimo'tkazgich texnologiyalarining rivojlanishi va samaradorligini oshirish uchun zarurdir.

Maqolada keltirilgan nazariy yondashuv va hisoblashlar kristall panjaradagi elektronlarning xatti-harakatini tushunishga katta hissa qo'shadi. Bu yondashuv yordamida elektronlarning kristall ichidagi harakati va ularning energetik zonalari o'rganildi, bu esa kristallar fizikasi bo'yicha yangi nazariy va amaliy yutuqlarga olib kelishi mumkin.

ADABIYOTLAR RO'YXATI

1. Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. 8th ed. Wiley, 2005.
2. Ashcroft, N.W., Mermin, N.D. Solid State Physics. Harcourt College Publishers, 1976.
3. Kronig, R. de L., Penney, W.G. Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. 1931, Vol. 130, pp. 499-513.
4. Blatt, F.J. Physics of Electronic Conduction in Solids. McGraw-Hill, 1968.
5. Ziman, J.M. Principles of the Theory of Solids. 2nd ed. Cambridge University Press, 1972.
6. Rozikov, J., Akhmedov, B., Muminov, I., & Ruziboev, V. (2019). DIMENSIONALLY QUANTIZED SEMICONDUCTOR STRUCTURES. Scientific and Technical Journal of Namangan Institute of Engineering and Technology, 1(6), 58-63.
7. Rustamovich, R. V., Yavkachovich, R. R., Forrux, K., & Arabboyevich, M. I. (2021). THEORETICAL ANALYSIS OF MULTIPHOTON INTERBAND ABSORPTION OF POLARIZED LIGHT IN CRYSTALS WITH A COMPLEX ZONE (PART 1). European science review, (3-4), 48-51.
8. Muminov, I. A., & Muminova, M. (2023). QATTIQ JISMLARNING KRISTALL PANJARALARI. Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences, 3(3), 1314-1317.
9. Arabboyevich, M. I., & Nabijon o'g, S. U. B. (2022). QATTIQ JISM KRISTALLARINI O'STIRISH NAZARIYASI. Scientific Impulse, 1(3), 696-698.