

**UOT 539.21****MÜRƏKKƏB FORMALI KVANT ÇUXURUNDA CIRLAŞMAMIŞ  
İKİÖLÇÜLÜ ELEKTRON QAZININ TERMODİNAMİKASI****S.R.FİQAROVA, G.N.XASIYEVA, T.H.İSMAYILOV***Bakı Dövlət Universiteti**figarov@bsu.az*

*Bu işdə böyük termodinamik potensialın ümumi ifadəsi əsasında mürəkkəb formalı kvant çuxurunda cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının (İEQ) kimyəvi potensialı, entropiyası və istilik tutumu hesablanmış və onların kvant çuxurunun parametrindən ( $U_0/\varepsilon_0$ ), temperaturdan və kvant çuxurunun enindən asılılıq ayrıları qurulmuşdur.*

**Açar sözlər:** mürəkkəb formalı kvant çuxuru, kimyəvi potensial, entropiya, istilik tutumu

Müasir nanotexnologiyanın sürətli inkişafı yarımkeçirici əsaslı aşağıölçülü elektron sistemlərinin geniş tədqiqinə rəvac verdi. Ölçüləri nanometr tərtibində olan belə sistemlərdə elektronun kvant hallarının öyrənilməsi müasir elektronikanın tələblərindən irəli gəlir. Bu sistemlərə misal olaraq kvant təbəqələrini (kvant quyuları), kvant məftillərini kvant nöqtələrini göstərmək olar. Bu sahədəki əsas problemlər [1-5] işlərində ətraflı şərh edilmişdir. Nanostrukturaların əsas üstünlüyü ondan ibarətdir ki, onların həndəsi ölçülərini dəyişməklə fiziki xassələrini idarə etmək mümkündür. Belə strukturlarda parametrləri, ilk növbədə yükdaşıyıcıların enerji spektrlərini və spinlərini məqsədyönlü şəkildə təyin etmək və dəyişmək üçün geniş imkanlar yaranır.

Hazırda nanotexnologiya metodları ikiölçülü elektron qazına (İEQ) malik ixtiyari profilli kvant çuxurları alınmağa imkan verir. Uzun illərdir ki, düzbucaqlı (DKÇ) və parabolik kvant çuxurlarında (PKÇ) İEQ-nın termodinamik, kinetik və optik xassələri öyrənilir və öyrənilməkdədir. Əsas özəllik ondadır ki, bu modellərdə Şredinger tənliyi dəqiq həll olunur və hesablanmalı olan fiziki kəmiyyətlər üçün analitik ifadələr alınır.

Bu işdə DKÇ və PKÇ modellərini özündə ehtiva edən  $U = U_0/\cos^2(z/a)$  potensiallı ( $U_0$ -potensial enerjinin minimumu,  $a$  - çuxurun  $z$  oxu istiqamətində

enidir) mürəkkəb formalı kvant çuxurunda cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının kimyəvi potensialı, entropiyası və istilik tutumu hesablanmışdır.

### Enerji spektri və hal sıxlığı funksiyası

$U = U_0/\cos^2(z/L)$  potensiallı kvant çuxuru üçün Şredinger tənliyinin həllindən İEQ-nin enerji spektri üçün

$$\varepsilon_{n,k_\perp} = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} + \varepsilon_n, \quad k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2,$$

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)^2, \quad \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad (1)$$

ifadəsi alınır [6].

Kvant ədədinin ( $n$ ) böyük qiymətlərində (1) enerji spektri sonsuz dərin düzbucaqlı potensial çuxurunun, kiçik qiymətlərində isə parabolik kvant çuxurunun enerji spektrini verir.

(1) enerji spektrinə uyğun vahid həcmə düşən hal sıxlığı funksiyası aşağıdakı şəkildədir [7]:

$$g(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n), \quad (2)$$

harada  $\Theta(\varepsilon - \varepsilon_n)$  Hevisayd funksiyasıdır.

### Böyük termodinamik potensial

Elektron qazının termodinamik parametrlərini, yəni kimyəvi potensialın, entropiyasını, istilik tutumunu və s. hesablamaq üçün əvvəlcə verilmiş enerji spektri üçün böyük termodinamik potensial hesablanmalıdır. Bu potensialın ümumi ifadəsi

$$\Omega(T, V, \mu) = -2k_0 T \cdot \sum_{n,k_x} \ln \left( 1 + \frac{\mu - \varepsilon(n, k_x, k_y)}{k_0 T} \right), \quad (3)$$

şəklindədir [8]. Burada  $\mu$  İEQ-nin kimyəvi potensialıdır. (3)-də

$$\sum_{k_x, k_y} \dots \Rightarrow \frac{L_1 L_2}{2\pi^2} \int (\dots) dk_x dk_y \quad (4)$$

keçidindən istifadə edərək cəmdən inteqralla keçib, bir dəfə hissə-hissə inteqrallama aparsaq,

$$\Omega(T, V, \mu) = - \frac{Vm}{\pi \hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \cdot \int_{\varepsilon_n}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_n) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (5)$$

olar. Burada  $k_\perp^2(\varepsilon, n) = 2m(\varepsilon - \varepsilon_n)/\hbar^2$  olduğu nəzərə alınmışdır;  $f(\varepsilon) = [1 + \exp(\varepsilon - \mu)/k_0 T]^{-1}$  Fermi-Dirak paylanma funksiyası,  $L_1$  və  $L_2$  İEQ-nin lay müstəvisinin ( $xy$  müstəvisi) ölçüləridir.

(5) düsturundakı inteqralı Fermi inteqralı vasitəsilə ifadə etmək olar:

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{Vm(k_0T)^2}{2\pi\hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \cdot F_2\left(\frac{\mu - \varepsilon_n}{k_0T}\right). \quad (6)$$

Fermi inteqralının məlum xassələrindən istifadə edərək cırlaşmamış elektron qazının böyük termodinamik potensialını aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{Vm(k_0T)^2}{2\pi\hbar^2 a} \sum_{n=0}^{n_0} \exp\left(-\frac{\mu - \varepsilon_0 \left(1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}}\right)^2}{k_0T}\right). \quad (7)$$

Böyük termodinamik potensialın bu ifadəsindən istifadə edərək cırlaşmamış *IEQ*-nin yükdaşıyıcılarını konsentrasiyasını, kimyəvi potensialın, entropiyasını və istilik tutumunu hesablamaq olar.

### **Konsentrasiya, kimyəvi potensial, entropiya, istilik tutumu**

Konsentrasiyanın məlum

$$n_{el} = V^{-1}(\partial\Omega/\partial\mu)_{T,V}$$

ifadəsinin köməyilə alırıq ki,

$$n_{el} = -\frac{m}{\pi\hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \cdot \int_{\varepsilon_n}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_n) \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right) d\varepsilon. \quad (8)$$

Cırlaşmamış elektron qazı üçün  $\exp(\mu/k_0T) \ll 1$  şərti ödənməlidir. (1) enerji spektri üçün cırlaşma şərti

$$\ln \frac{n_{el}\pi\hbar^2 a}{mk_0T} \gg 1. \quad (9)$$

şəklinə düşür. Görünür ki, *IEQ* böyük konsentrasiyalar və kiçik temperaturlarda cırlaşmış, kiçik konsentrasiyalar, böyük temperaturlarda isə cırlaşmamış olur. Bu deyilənləri nəzərə alsaq, cırlaşmamış elektron qazındakı elektronların konsentrasiyası üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$n_{el} = -\frac{mk_0T}{\pi\hbar^2 a} \sum_{n=0}^{n_0} \exp\left(-\frac{\mu - \varepsilon_0 \left(1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}}\right)^2}{k_0T}\right). \quad (10)$$

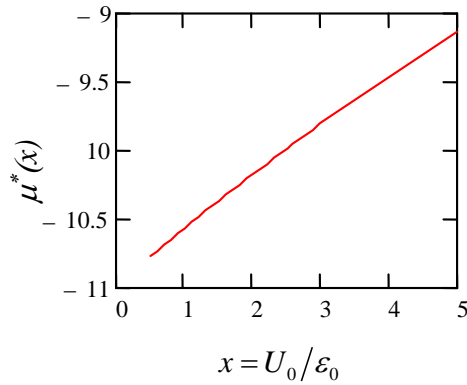
(10) ifadəsindən kimyəvi potensialı təyin edirik:

$$\mu = -2\varepsilon_0 + U_0 + 2\sqrt{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 U_0} + k_0T \cdot \ln \frac{n_{el}\pi\hbar^2 a}{mk_0T \cdot Z}, \quad (11)$$

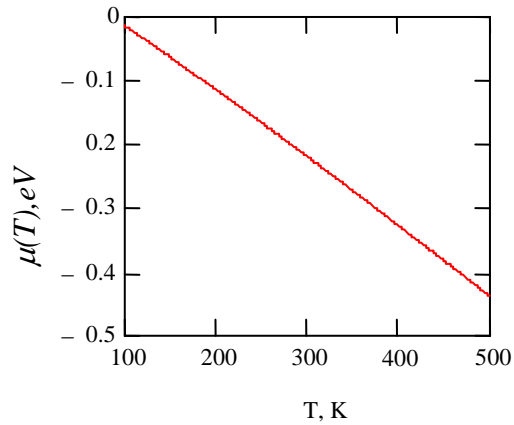
harada

$$Z = \sum_{n=0}^{n_0} \exp \frac{-4\varepsilon_0 n \left( 1 + n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)}{k_0 T} . \quad (12)$$

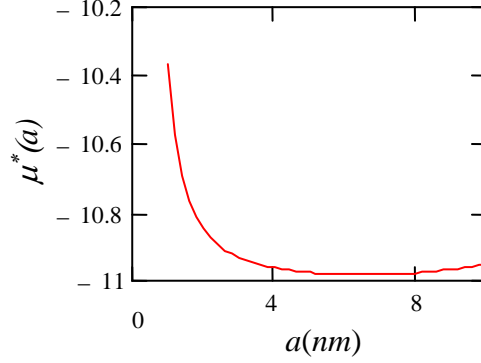
(11) düsturu əsasında cırlaşmamış  $IEQ$ -nın kimyəvi potensialının temperaturdan və kvant çuxuru parametrindən və çuxurun enindən asılılıq əyriləri verilmişdir. Burada  $\mu_F^* = \mu_F / k_0 T$ ,  $m = 0.067 m_0$ ,  $\varepsilon_0 = 0.01 eV$ ,  $a = 10 nm$ ,  $n_{el} = 10^{21} m^{-3}$ ,  $U_0 = 0.03 eV$ .



**Şəkl.1.** Cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının gətirilmiş kimyəvi potensialının  $U_0/\varepsilon_0$  kvant çuxuru parametrindən asılılığı.



**Şəkl.2.** Cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının kimyəvi potensialının temperaturdan asılılığı.



**Şəkil.3.** Cırışmamış ikiölçülü elektron qazının gətirilmiş kimyəvi potensialının kvant çuxurunun enindən asılılığı.

Şəkil 1 və şəkil 3-də (11) ifadəsi əsasında kimyəvi potensialın kvant çuxurunun parametrindən ( $U_0/\varepsilon_0$ ), temperaturdan və kvant çuxurunun enindən asılılıq əyriləri verilmişdir.

Şəkil 1 və şəkil 2-dən görünür ki, cırışmış elektron qazında olduğu kimi [7], cırışmamış elektron qazı üçün də kvant çuxuru parametrinin artması ilə kimyəvi potensial artır, temperaturun artması ilə azalır. Şəkil 3-dən isə görünür ki, kvant çuxurun eninin artması ilə kimyəvi potensial hiperbolik qanunla azalır.

(5) ifadəsinin köməyilə  $\dot{I}EQ$ -nin entropiyası üçün aşağıdakı ümumi ifadəni alırıq:

$$S = - \frac{m}{2\pi\hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \cdot \int_{\varepsilon_n}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_n)(\varepsilon - \mu) \left( - \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (13)$$

(13)-dəki inteqralı Fermi inteqralları ilə ifadə etmək olar:

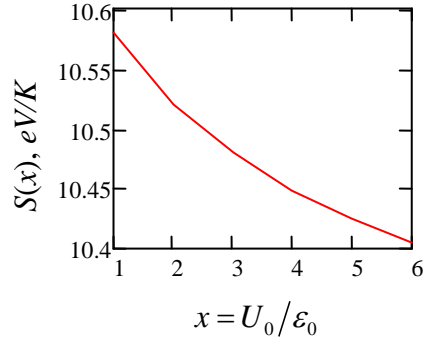
$$S = - \frac{Vm k_0^2 T}{\pi\hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \cdot \left\{ F_2 \left( \frac{\mu - \varepsilon_n}{k_0 T} \right) - \left( \frac{\mu - \varepsilon_n}{k_0 T} \right) F_1 \left( \frac{\mu - \varepsilon_n}{k_0 T} \right) \right\}. \quad (14)$$

Spektrin (1) ifadəsini (14)-də nəzərə alsaq,

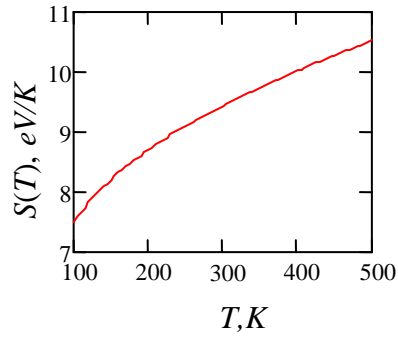
$$S = - \frac{Vm k_0^2 T}{\pi\hbar^2 a} \sum_{n=0}^{n_0} \left\{ 2 - \frac{\mu - \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)^2}{k_0 T} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{\mu - \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)^2}{k_0 T} \right\}. \quad (15)$$

olar.

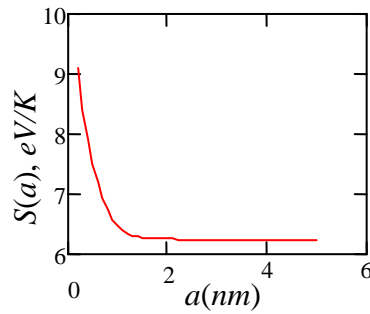
(15) düsturu əsasında cırışmamış  $\dot{I}EQ$ -nin entropiyasının temperaturdan və kvant çuxuru parametrindən və çuxurun enindən asılılıq əyriləri verilmişdir.



**Şək.4.** Cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının entropiyasının  $U_0/\epsilon_0$  kvant çuxuru parametrindən asılılığı.



**Şək.5.** Cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının entropiyasının temperaturdan asılılığı



**Şək.6.** Cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının entropiyasının kvant çuxurunun enindən asılılığı.

Şəkil 4 və şəkil 5-dən görünür ki, cırlaşmamış halda ikiölçülü elektron qazının entropiyası kvant potensial çuxuru parametrinin artması ilə hiperbolik

azalır, temperaturun artması ilə artır. Eləcə də şəkil 6-dan görünür ki, kvant çuxurunun eninin müəyyən qiymətinə qədər entropiya kəskin olaraq azalır və daha sonra demək olar ki, sabit qalır.

Eyni qayda ilə (14) ifadəsindən istifadə edərək  $C_V = T(\partial S/\partial T)_V$  məlum münasibətdən istilik tutmu üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$C_V = \frac{Vmk_0^2T}{\pi\hbar^2a} \sum_{n=0}^{n_0} \left\{ 2 - \frac{\mu - \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)}{k_0T} + \left( \frac{\mu - \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)}{k_0T} \right)^2 \right\} \cdot \exp \left( \frac{\mu - \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)}{k_0T} \right). \quad (16)$$

Beləliklə, ikiölçülü elektron qazının böyük termodinamik potensialının ifadəsinə əsasən mürəkkəb formalı kvant çuxurunda cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının entropiasını, kimyəvi potensialı və istilik tutumunu təyin etmək olar.

Bu iş Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmi İnkişaf fondunun maliyyə yardımı ilə yerinə yetirilmişdir. -Qrant № EIF-2013-9(15)-46/04/1

#### ƏDƏBİYYAT

1. Борисенко В.Е. Нанoeлектроника: теория и практика / 2-е издательство. М.: Бином, 2013, с. 366 .
2. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию/ перевод с японск. 2-е издательство. М.: Бином, 2008, с.134.
3. Усанов Д.А., Скрипаль А.В. Физические основы нанoeлектроники. Саратов, 2013, с.128.
4. Delerie C., Lannoo M. Nanostructures: Theory and Modelling. Springer-Verlag. Berlin Herdelberg. 2004, p. 305.
5. Mitin V.V., Sementsov D.I., Vagidov N.Z. Quantum Mechanics for Nanostructures. Cambridge University Press. 2010, p. 432
6. Щварцбург А.Б. Дисперсия электромагнитных волн в слоистых и нестационарных средах, Успехи физических наук, 170 (2010) 1297-1324.
7. Əsgərov В.М., Fiqarova S.R., Orucova G.N. Kvant çuxurunda elektronların hal sıxlığı funksiyası / BDU Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, № 4, 2012, s.101-105.
8. Fiqarova S.R., Khasiyeva G.N., Fiqarov V.R. Thermodynamic Properties of Electron Gas in Complex-Shaped Quantum Well, Physics E, 69 (2015) 24-26 p.

## ТЕРМОДИНАМИКА НЕВЫРОЖДЕННОГО ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В КВАНТОВОЙ ЯМЕ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ

С. Р.ФИГАРОВА, Г. Н.ХАСЫЕВА, Т. Г.ИСМАИЛОВ

### РЕЗЮМЕ

В данной работе исследованы химический потенциал, энтропия, теплоемкость двумерного невырожденного электронного газа. Получены общие выражения для химического потенциала, энтропии в зависимости от температуры, потенциала квантовой ямы и толщины квантовой ямы. На основе общих формул построены графики зависимости химического потенциала, энтропии от температуры, потенциала квантовой ямы и ее толщины. Отмечено, что уровень Ферми и энтропия уменьшаются с ростом толщины квантовой ямы и возрастают с увеличением высоты квантовой ямы. Также показано, что химический потенциал невырожденного двумерного электронного газа уменьшается с увеличением температуры, а энтропия возрастает.

**Ключевые слова:** квантовая яма сложной формы, химический потенциал, энтропия, теплоемкость

## THERMODYNAMIC PROPERTIES OF A TWO-DIMENSIONAL NONDEGENERATE ELECTRON GAS IN COMPLEX-SHAPED QUANTUM WELL

S.R.FIGAROVA, G.N.KHASIYEVA, T.H.ISMAYILOV

### SUMMARY

In this paper, the chemical potential, entropy and heat capacity of a two-dimensional nondegenerate electron gas are studied. The general expressions for the chemical potential and entropy, depending on the temperature, potential and thickness of the quantum well are given. On the basis of the given general formula, the dependence of the chemical potential and entropy on temperature, potential and thickness of the quantum well are plotted. It is noted that the Fermi level and the entropy decreases with an increase in quantum well thickness and increases with an increase in quantum well parameter. It is also shown that the chemical potential of the nondegenerate two-dimensional electron gas is reduced with an increase in temperature and the entropy increases with an increase temperature.

**Key words:** complex-shaped quantum well, chemical potential, entropy, heat capacity

*Redaksiyaya daxil oldu: 20.05.2015-ci il*

*Çapa imzalandı: 17.11.2015-ci il*