İÇİNDEKİLER

ÖZET

KANE TİPİ YARIİLETKEN KUANTUM NOKTALARINDA TÜNEL OLAYI.

Serdar TEZ

Bu tez çalışmasında, Kane tipli yarıiletken kuantum noktalarında tünel olayı teorik olarak tanımlanmıştır. Küresel basamak potansiyeli için üç bant yaklaşımının uygulanması ile tek ve çift durumların direnci R ve geçme olasılığı T'nin analitik ifadeleri elde edilmiştir. Direnç, Landauer formülü kullanılarak hesaplanmıştır. Bir bant modelinden farklı olarak, bariyer yüksekliği sonsuza giderken ($V \rightarrow \infty$), geçme olasılığı T'nin sonlu bir değere sahip olduğu gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler:Kane tipli yarıiletken, tünel olayı, kuantum noktası

ABSTRACT

TUNEL EFFECT IN KANE TYPE SEMICONDUCTOR QUANTUM DOTS

Serdar TEZ

In this work, the theoretical treatment of the tunneling process in Kane type spherical quantum dots is described. The analytical expressions for transmission probabilities T and resistance R of odd and even states are obtained by using the three band approximation for spherical step potential. Resistance is calculated by using the Landauer formula. It's shown that the transmission probability T has a finite value when the barrier height tends to infinity ($V \to \infty$), which is different from the one-bant model.

Key Words: Kane type semiconductor, tunneling process, quantum dots

TEŞEKKÜR

Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne yüksek lisans tezi olarak sunduğum "Kane tipi yarıiletken kuantum noktalarında tünel olayı" adındaki bu çalışma, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü öğretim üyelerinden Prof. Dr. Arif BABAYEV' in rehberliğinde gerçekleştirildi. Çalışmam boyunca yardımlarını esirgemeyen hocam Prof. Dr. Arif BABAYEV' e teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü araştırma görevlileri Şükrü ÇAKMAKTEPE ve Durmuş Ali ALDEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Son olarak da; Eğitimim boyunca daima desteklerini esirgemeyen aileme teşekkür ederim.

Serdar TEZ

Simgeler (Kısaltmalar) Dizini

Ψ	Dalga fonksiyonu
E	Enerji
V_0	Basamak potansiyelinin yüksekliği
m	Elektron kütlesi
k, $k^{'}$, δ	Dalga vektörü
R	Yansıma katsayısı
T	Geçme katsayısı
Γ_6	Brillouin bölgesinin merkezi
V_1	Ağır deşik (heavy hole) bandı
V_2	Hafif deşik (light hole) bandı
V_3	Spin-orbital etkileşme sonucunda yarılmış deşik bant
l	Bandların tam açısal momentum kuantum sayısını
τ	Bandların numarasını
E_g	Yasak enerji aralığı
Δ	Spin-yörünge parçalanma eni
b	İletkenlik ve valans bantları arasındaki momentum operatörünün matris elemanı
$f_0^{\pm}$	İletkenlik bandı için dalga fonksiyonu
$f_1^{\pm}$	Ağır deşik için dalga fonksiyonu
$f_2^{\pm}$	Hafif deşik dalga fonksiyonu
$f_3^{\pm}$	Spin orbital parçalanmış deşik için dalga fonksiyonu

C_n terimler	Diferansiyel denklemin çözümünden gelen sabit
J	Akım operatörü
$h_n^{(i)}$	Hankel fonksiyonları
r	Geçen dalga için katsayı
t	Yansıyan dalga için katsayı
$K_{A,}$ K_B	Dalga vektörü
ε_f	Fermi enerjisi
n	Elektron yoğunluğu
v_f	Fermi hızıdır
R_e	Direnç
E_p	Kane parametresi
P	Momentum operatörünün matris elemanı
V	Basamak potansiyelinin yüksekliği

Şekiller Dizini

Sayfa

Çizelgeler Dizini

Sayfa

1. GİRİŞ

Son dönemde hesaplama teknikleri, bilgisayarların hesaplama hızına (10^9 Hz) ve mikrosistemlerin büyüklüğüne (10^{-7}m) bağlı olarak ulaşabileceği en ileri seviyeye ulaşmıştır. Klasik fizik yasalarının uygulanabilirlik sınırı 10^{-7}m dir. Hesaplama hızı bir miktar arttırılarak mikrosistemin büyüklüğü azaltılmaya çalışıldığında kendine göre kanunları olan yeni bir alana; nano dünyaya ulaşılır. Nano dünya ile mikro dünya arasındaki temel fark; nano dünyada, mikro dünyada bulunmayan kuantum etkilerinin bulunmasıdır. Bu yüzden çağdaş hesaplamada kullanılan teknolojik cihazlar şimdiye kadar kullanılan ilkelerden faklı olarak yeni ilkelere ihtiyaç duyar.

Nano kelime anlamı ile herhangi bir fiziksel büyüklüğün bir milyarda biri anlamına gelmektedir. Nanoyapılar uzunluk olarak bakıldığında yaklaşık 10-100 atomluk sistemlere (10^{-9} metre) karşılık gelmektedirler. Bu boyutlarda sistemlerin fiziksel davranışlarında normal sistemlere kıyasla farklı özellikler gözlemlenmektedir. Nanobilim ve nanoteknoloji olarak nitelendirilen bu farklılıklar, yaklaşık 10 yıldır dünya ülkelerinin sivil-askeri bilim ve teknoloji stratejilerini belirler hale gelmiştir.

Nano-ölçek düzeyinde, malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklı olup nano-ölçeğe yaklaştıkça birçok özel, yararlı olay ve yeni özellikler ortaya çıkmaktadır. Örneğin, iletim özellikleri (momentum, enerji ve kütle) artık sürekli olarak değil ancak kesikli olarak tarif edilmektedir. Benzer olarak, optik, elektronik, manyetik ve kimyasal davranışlar klasik değil kuantum olarak tanımlanmaktadır. Maddeyi nanometre seviyesinde işleyerek ve ortaya çıkan değişik özellikleri kullanarak, nano-ölçekte yeni teknolojik aygıtlar ve malzemeler yapmak mümkün olmuştur. Örneğin, tarama tünelleme ve atomik kuvvet mikroskoplarını kullanarak yüzey üzerinde atomları iterek birbirlerinden ayırmak ve istenilen şekilde dizmek mümkündür. Bütün bu gelişmeler, 19. yüzyılda dünyayı yeniden şekillendiren sanayi devrimine eşdeğer bir bilimsel ve teknolojik devrim başlatmıştır. Bu şekilde atom ve moleküller ile oynayarak tek molekülden oluşan transistor ve elektronik aygıtlar gerçekleştirilmiş ve dünyada birçok grubun aktif çalışmaları ile geliştirilmektedir.

Bütün bu çalışmalar ve gelişmeler elektronik, kimya, fizik, malzeme bilimi, uzay ve hatta sağlık bilimlerini bir ortak ara kesitte buluşturmuştur.

Kuantum fiziğinin uygulamalarından biri olan kuantum mühendisliğinin, çalışma ilkeleri kuantum etkilerine bağlı olarak şekillenen yeni cihazlar üretmeyi hedefler. Gen mühendisliğine benzeyen yarıiletkenler elektroniğinde, kuantum mühendisliğinin başarıya ulaşması sonucu yapay kuantum yapıları; kuantum noktaları, kuantum telleri, kullanılarak yeni elektronik cihazlar elde edilmektedir. Yapay kuantum yapılar doğada bulunmayan yapılardır. Bu yapılarının temelinde kuantum fiziği, kuantum mühendisliği ve ileri teknoloji vardır. Son yıllarda bu üç alanın birlikteliği teori ve pratikte büyük önemi olan neticeler vermiştir. Gelecek de nanoteknoloji sayesinde süper bilgisayarlara mikroskop altında bakılabilecek, insan vücudunun içinde hastalıklı dokuyu bulup iyileştiren ameliyat yapan nanorobotlar bulunabilecek, insan beyninin kapasitesi ek nano hafızalarla güçlendirilebilecek ve kirliliği önleyen nano parçacıklar sayesinde fabrikalar çevreyi çok daha az kirletebilecektir. Ulusal güvenliği ilgilendiren konularda nano malzeme bilimi, yeni savunma sistemlerinin geliştirilmesinde, haber alma / gizlilik konularına yönelik çok küçük boyutlarda aygıtların yapılmasında kullanılacaktır. Birim ağırlık başına halen kullanılmakta olanlardan 50 kat daha hafif ve çok daha dayanıklı malzemeler üretilebilecek. Bunların sonucu olarak insanın günlük yaşamında kullandığı tekstil ürünleri gibi ürünler değişebileceği gibi, uzay araştırmalarında ve havacılıkta yeni roket ve uçak tasarımlarının ortaya çıkması mümkün olacaktır. Nanobilim ve nanoteknolojinin odak noktaları, düşük boyutlarda baskın hale geçen boyut, sınır ve kuantum etkileri gibi temel fizik araştırması içeren konuların yanında, atomik boyutlarda görüntülemede deneysel yöntemlerin geliştirilmesi, Angstrom altı (10^{-10} metreden küçük) boyutlarda ölçüm yapabilme teknikleri, düşük boyutlarda eş tip malzeme üretebilme, malzeme yapısını atomik boyutlarda kontrol edebilme, kızılaltı ve morötesi radyasyonlara tepkisi kontrol edilebilir malzeme ve özel amaca yönelik aygıt geliştirme yöntemleridir.

Bilgisayar çağının başları olan 1950'lerden bu yana yaklaşık her 18 ayda bir bilgisayar performansının iki katına çıktığı ve büyüklüğünün yarıya indiği bilinmektedir (Moore kuralı). Bu kural 2020'li yıllara kadar geçerliliğini koruyacak; bu yıllarda, üretilen bilgisayarlar moleküler boyutlara kadar gelip dayanacaktır. Şu anda 40 milyon transistorlu bir işlemci, 2015 yılında 5 milyar transistor den oluşacaktır.

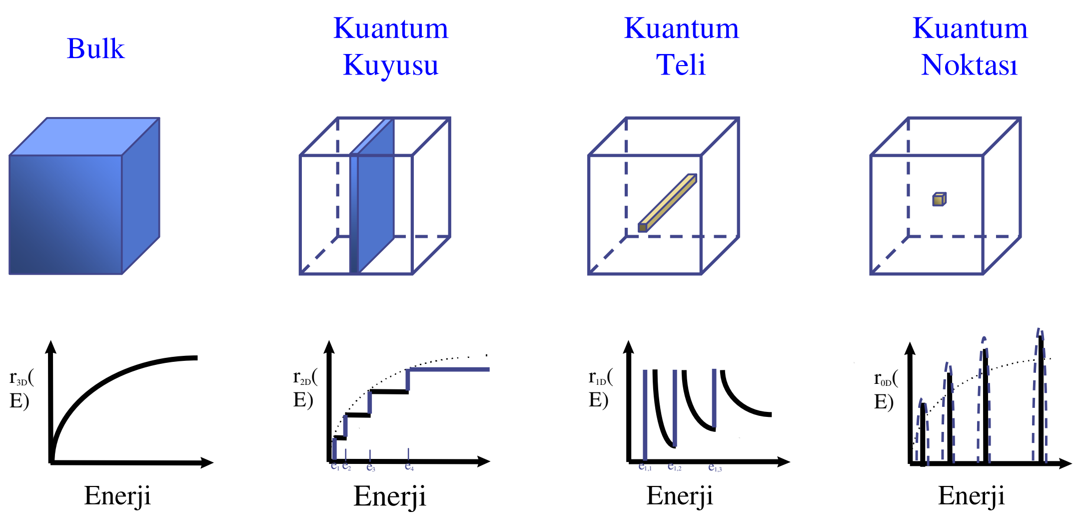
Yine son yıllarda boyuta göre kuantumlanmış enerji durumlarının, bilgi üretilmesi ve kaydedilmesi teknolojisine uygulanılabilirliği tartışılmaya başlanmıştır. Bilgi sistemi, bilginin alınması, işlenmesi ve verilmesini sağlayan cihazlardan oluşmaktadır. Bilgiyi kodlanması için nano-yapılarda meydana gelen kuantum etkilerini denetleme kapasitesine sahip olunmalıdır. Nanoyapılarda bilginin kodlaştırılması için gerekli üç kuantum etkisi; yük taşıyıcıların enerjisinin boyuta göre kuantumlanması, girişim ve tünel olayıdır. Burada asıl görev kuantum noktalarına (büyüklükleri 1 nm merebesindeki atomlar sistemi) düşmektedir. Elektronlar kuantum noktalarında lokalizasyona uğradıklarından enerji spektrumları da atomlar da olduğu gibi kuantumludur. Bu yüzden kuantum noktaları yapay atomlar olarak kabul edilmektedir. Yapay kuantum sistemleri aslında A^3B^5 ve A^2B^6 tipli yarıiletkenlerden (Kane tipi yarıiletkenler) üretilir. Dolayısıyla A^3B^5 ve A^2B^6 tipli yarıiletkenlerden üretilmiş kuantum yapılarında, yukarıda bahsedilen kuantum hadiselerini incelemek çok önemlidir.

Bu şekilde bilgi işleme hızı oldukça artarken enerji kullanımı çok az olacaktır. Nanoteknoloji devriminin insanlığın yakın geleceğinde yaratacağı değişiklik sadece ana hatları ile tahmin edilebilir. (Çıracı vd, 2004).

İnce bir yarıiletken tabakada elektronların (veya deşiklerin) sınırlandırılması onların davranışlarında değişikliğe yol açacaktır. Bu değişiklikler enerji ve durum yoğunluğu ifadelerinde gözlenir. Elektronun iki boyutlu bir kuyuda, bir boyutlu bir telde ve boyutsuz kuantum noktasında sınırlandırmak mümkündür. Elektronun serbestlik derecesini D_f ve sınırlama yönlerini D_c ile gösterirsek bütün katı sistemler için $D_f+D_c=3$ şeklindedir. Dört boyutsal sistem için bu durum aşağıdaki gibi özetlenebilir (Harrison, 1999).

Çizelge 1.1 Serbestlik derecesi D_f ve sınırlandırma ölçüsü D_c olmak üzere dört temel sistem

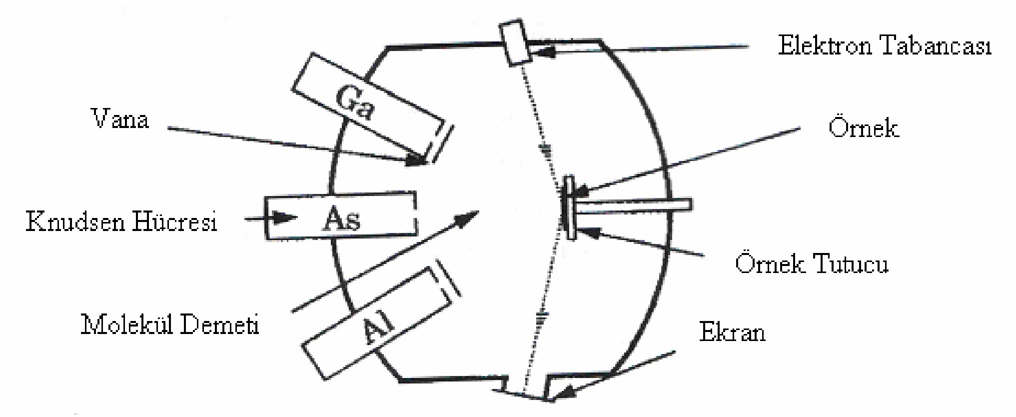
Sistem	D_c	D_f
Bulk	0	3
Kuantum kuyusu	1	2
Kunatum teli	2	1
Kuantum noktası	3	0



Şekil 1.1 Kuantum nanoyapılar ve bu yapılara göre durum yoğunluğu değişimi

Heteroyapıların verimli bir şekilde kullanılabilmeleri için, yüksek kalitede ara yüzeylere sahip olmaları gerekir. İki materyalin atomik yapılarının birbirleriyle uyum içinde olması ve ara yüzeyin çeşitli safsızlıklar veya diğer kusur tipleri ile bozulmaması çok önemlidir. Sıvı-faz epitaksi gibi yarıiletken büyütmenin daha eski yöntemleri bu kriterlerden bazılarını sağlayabilir ve bu yöntemler çift-heteroyapı lazerleri gibi yapılarda kullanılmaktadır, ancak daha özelleştirilmiş yöntemlere genel olarak ihtiyaç vardır. En yaygın yöntemleri moleküler-demet epitaksi ve metal-organik kimyasal buhar çöküntüsü'dür.

Moleküler-demet epitaksi ya da MBE ilke olarak oldukça basit bir tekniktir. MBE aletinin taslağı Şekil 1.2 de gösterilmiştir. Heteroyapının büyütüleceği örnek bir buharlaştırıcı içindeki tutucuya yerleştirilir. Bu buharlaştırıcının bulunduğu ortam yüksek vakum yardımıyla boşaltılmıştır. Heteroyapıyı oluşturan, burada Ga, As ve Al elementleri, fırın içerisinde örneğe doğru buharlaştırılır. Düşük basınçta çarpışmalar arasında moleküllerin ortalama serbest yolu odanın genişliğinden fazladır. Bu gazların Knudsen veya moleküler akış rejimidir ve fırınlar Knudsen veya K-hücreleri olarak adlandırılır. K-hücrelerinden ortaya çıkan moleküller yüksek basınçta ki bir gaz gibi yayılmazlar, ancak moleküler demet şeklinde çarpışma olmaksızın düz hatlarda örneğe veya başka bir şeye çarpana kadar hareket ederler. Kapaklar açıldığı zaman büyütme başlar ve her elementin akışı her ocağın sıcaklığı aracılığıyla denetlenir.

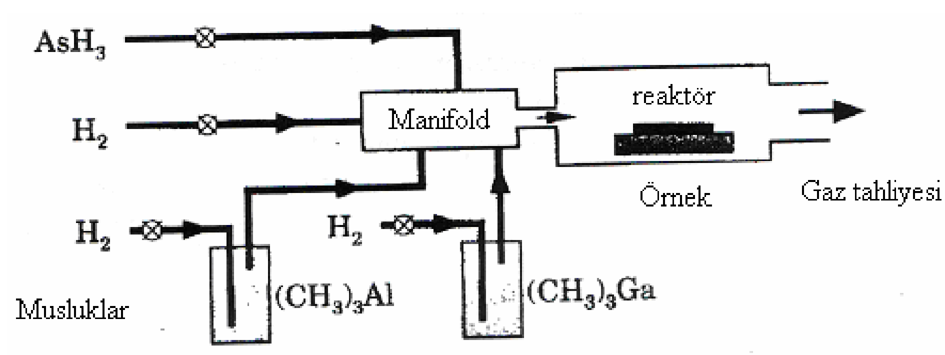


Şekil 1.2 Taslak olarak MBE

Ek hücrelerin kullanımı ile dopant (dope edilen maddeler) eklenir. Çoğunlukla donor (verici) Si'dir. Periyodik cetvelin IV. grubundadır, bu yüzden, III. ve V. grup bileşiklerde akseptör (alıcı) veya verici gibi davranıp davranmayacağı açık değildir. Pratikte genellikle verici gibi davranır, ancak alışılmış (100)'dan başka bir yüzeyde büyütülmesiyle değişebilir. Çok yüksek konsantrasyonlarda (10^{25} m^{-3}) her iki doğrultuya da eğimlidir, hem verici hem de alıcıdır. Çoğunlukla alıcı Be'dir.

Bu teknik, ilke olarak kolay olmasına rağmen birçok varsayımlar uygulamada kolay olmadığını göstermiştir. Örneğin dilimler aşırı saflıkta büyütülmelidir. Eğer bu gerçekleşmezse özelliklerini kaybederler. Bu sıra ile K-hücresi aracılığı ile kirletilmeyen saf materyalleri gerektirir. Buharlaştırıcıdaki arka plan basıncı kirliliği indirgemek için düşük tutulmalı, K hücrelerinden akış örneğe doğru değişmez biçimde olmalıdır aksi takdirde örneğe doğru giden bileşimlerde değişimler olacaktır. Fırın sıcaklıkları akışı sabit tutacak şekilde yakından kontrol edilmelidir. Örneğin sıcaklığı önemlidir. Düşük sıcaklıklarda tavlama yoluyla kusurların ortadan kaldırılması için gerekli zaman olmayacaktır. Sıcaklık çok yüksekse ara yüzeyde lekelenme ve istenmeyen difüzyon olacaktır. Yüzey biçimi karmaşık şekilde sıcaklığa bağlıdır ve AlGaAs ve GaAs farklı şartlar altında daha iyi büyütülür. MBE yavaş bir yöntemdir, her saate 1µm materyal büyütülür. MBE'nin üstün yanları farklı materyaller arasında oldukça kesin eklemleri kapsar, tabakanın kalınlığı üzerinde iyi kontrol ve yeterli miktarda üretilebilirliği sağlar. Açık dezavantajı maliyetidir.

Metal organik kimyasal buhar çöküntüsü, veya MOCVD (metal organik buharlaşma-faz epitaksi veya MOVPE olarak da bilinir) yüksek nitelikli heteroyapıların üretilmesinde yeterli bir başka yöntemdir. Şekil 1.3 genellikle atmosferik basınçta çalışan aletin oldukça basitleştirilmiş bir diyagramını göstermektedir.



Şekil 1.3 Taslak olarak MOCVD

Örnek içerisinde hidrojen taşıyan farklı gazların geçirildiği oda da ısıtılmış bir bloğa konulur, büyütülen materyalin kompozisyonunu kontrol etmek için gaz bileşimi çok çabuk bir biçimde değiştirilebilir. V. grup materyaline ait, bir alkali metal ve bir hidrit arasındaki temel reaksiyon, aşağıdaki gibidir.

$$(CH_3)_3Ga + AsH_3 \xrightarrow{650^o C} GaAs \downarrow + 3CH_4$$

Aletin oldukça zehirli gazları bulunduruyor olması temel sorun olmasına rağmen MBE'ye göre daha kullanışlıdır. MOCVD daha iyi optoelektronik aygıt üretmede

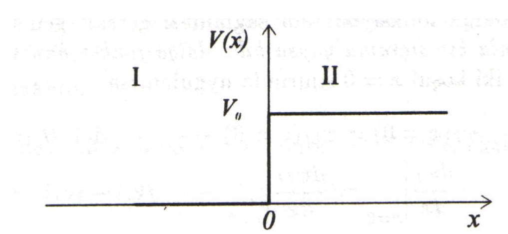
MBE'den ünlüdür. Daha hızlıdır ve ticari üretim için başarılıdır. Aynı anda çok sayıda dilim büyütülebilir.

Temel MBE ve MOCVD tekniklerinden pek çok yeni yöntemler geliştirilmiştir. Bunlara örnek olarak, kimyasal-demet-epitaksi (CBE) veya metal-organik-moleküler-demet epitaksi (MOMBE) yöntemleri gösterilebilir. Burada geleneksel MBE'de kullanılan katı kaynakları yerine MOCVD'dekiler konulmuştur.

Diğeri atomik-katman epitaksi (ALE), burada reaktanlar ayrı ayrı temin edilmiştir, tabaka tabaka oluşturmak için büyümeye zorlanmıştır. Aygıtların performanslarını geliştirmek için tabakaların bileşimi ve kalınlığının kontrolünün sağlanması hepsinde amaçlanmıştır (Davies, 1998).

Başlangıçta, parçacığın soldan sağa doğru ilerlediğini varsayalım. Parçacık soldaki düzlükte iken hareketi serbest olup toplam enerjisi $E=p^2/2m$ dir. Parçacığa ancak potansiyel basamağını tırmanırken $F=-dV/dx$ kadar bir kuvvet etki eder. Klasik mekaniğe göre burada iki durum söz konusudur: Parçacığın toplam enerjisi V_0 dan büyükse ($E>V_0$) engeli aşar ve sağdaki düzlükte yine serbest fakat toplam enerjisi $E-V_0$ olarak yoluna devam eder. $E<V_0$ ise, parçacık yokuşta gittikçe yavaşlar ve $E=V(a)$ olan bir a noktasından geri döner (klasik dönüm noktası). Parçacığın bu durumda, engele sızma olasılığı yoktur.

Bu klasik çerçeveyi belirledikten sonra, aynı problemi kuantum mekaniğinde inceleyelim. Matematik zorlukları en aza indirmek amacıyla, Şekil 1.4 da gösterilen şematik bir basamak potansiyelini ele alalım.



Şekil 1.4 Basamak potansiyelinin şema olarak gösterimi

Potansiyel

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V, & x>0\end{cases} \qquad (1.1)$$

olarak tanımlanır. Kararlı durum dalga fonksiyonlarını bulmak üzere zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (1.2)$$

her bir bölge için ayrı ayrı yazılırsa

I. bölgede (x<0) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi(x) \qquad (1.3)$$

II. bölgede (x>0) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V_0\psi(x)=E\psi(x) \qquad (1.4)$$

olur. Bu aşamada enerjinin V_o dan büyük veya küçük oluşuna göre çözümler farklı olur.

$E>V_0$ durumunda her bir bölge için, sırasıyla,

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \text{ ve } k'^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \qquad (1.5)$$

gibi iki pozitif dalga sayısı tanımlarsak, denklemler ve çözümleri

I. Bölge $$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}+k^2\psi_I=0\rightarrow\psi_1=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \qquad (1.6)$$

ve II.Bölge $$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+k'^2\psi_{II}=0\rightarrow\psi_{II}=Ce^{ikx}+De^{-ikx} \qquad (1.7)$$

olurlar (Burada A, B, C, D integrasyon sabitleridir). Bu çözümler, her bölgede $\pm x$ yönlerinde ilerleyen düzlem dalgalardır.

Şimdi problemin başlangıç ve sınır koşullarını koyalım: Başlangıçta parçacığın I. bölgeden II.'ye gönderildiği varsayılmıştı. Buna göre basamak noktası (x=0) dan ötede ancak sağa doğru ilerleyen bir dalga (yani, $e^{ik'x}$) oluşabilir. Bu koşulu sağlamanın tek yolu $e^{-ik'x}$ teriminin katsayısını sıfır yapmaktır. Potansiyel sonlu bir sıçrama yapsa bile, dalga fonksiyonu ve onun 1. türevi sürekli olmalıdır. Bu iki koşul x=0 sınırında uygulanırsa,

$$\psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)\rightarrow A+B=C \qquad (1.8)$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \rightarrow ikA - ikB = ik'C \tag{1.9}$$

yazılır. Bu iki denklemden B ve C sabitleri A cinsinden bulunabilir.

$$B = \frac{k-k'}{k+k'}A \text{ ve } C = \frac{2k}{k+k'}A \tag{1.10}$$

Komple çözüm

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A\dfrac{k-k'}{k+k'}e^{-ikx}, x<0 \\ A\dfrac{2k}{k+k'}e^{-ik'x}, x>0 \end{cases} \tag{1.11}$$

olur. Bu çözüm klasik beklentiye tamamen uymaz: Klasik mekanikte parçacık $E>V_0$ enerjisiyle ikinci bölgeye mutlak geçiyordu. Oysa şimdi, geri yansıma olasılığı da vardır. Bu dalga özelliğinin bir sonucudur.

Klasik dalga kuramındaki yansıma ve geçme katsayılarının benzerleri

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \qquad T = \frac{k'}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4kk'}{(k+k')^2} \tag{1.12}$$

tanımlanırsa

$$R+T=1 \tag{1.13}$$

olduğu kolayca görülebilir (Karaoğlu, 1998). Geçme ve yansıma olasılıklarının toplamının 1 oluşu olsallık korunumunun başka bir türlü ifadesidir.

$E<V_0$ durumunda her bir bölge için;

Yine, her iki bölge için pozitif sabitler,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{ve} \quad \delta^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} \tag{1.14}$$

tanımlayalım.

I. Bölge: $\dfrac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0 \rightarrow \psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ (1.15)

II. Bölge $\dfrac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \delta^2\psi_{II} = 0 \rightarrow \psi_{I1} = Ce^{\delta x} + De^{-\delta x}$ (1.16)

olurlar. Birinci bölgede yine her iki yönde ilerleyen düzlem dalga vardır. İkinci bölgede bu kez reel üstel fonksiyonlar oluşur.

Sınır koşullarına bakalım: Ψ_{II} nin $x \to +\infty$ de sonlu kalması gerektiğinden $e^{+\delta x}$ terimi kabul edilemez. Bunun için D=0 olmalıdır. Dalga fonksiyonu ve 1. türevinin x=0 da sürekli olma koşulları

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \to A + B = C \tag{1.17}$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \to ikA - ikB = -\delta C \tag{1.18}$$

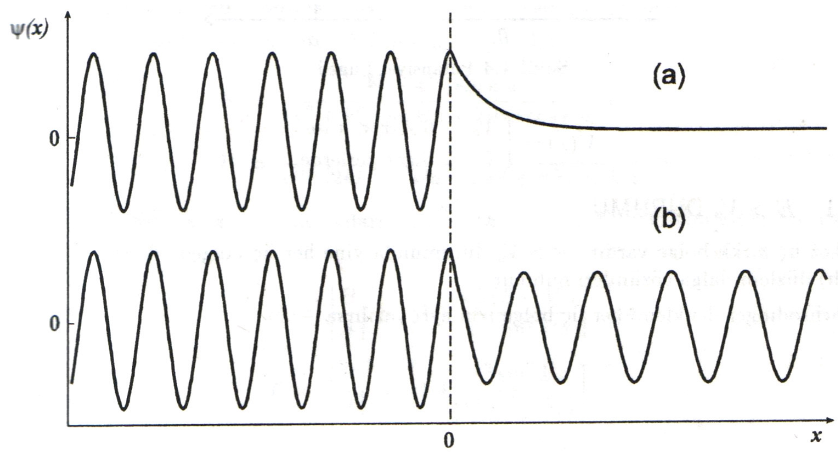
denklemlerini verir. Buradan

$$B = \frac{k - i\delta}{k + i\delta} \text{ ve } C = \frac{2k}{k + i\delta} \tag{1.19}$$

bulunur. Tam çözüm

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A\dfrac{k - i\delta}{k + i\delta}e^{-ikx}, x < 0 \\ A\dfrac{2k}{k + i\delta}e^{-\delta x}, x > 0 \end{cases} \tag{1.20}$$

olur. (Şekil 1.5 b)



Şekil 1.5 Basamak Potansiyel çözümleri (a) $0<E<V_0$ durumu (b) $E> V_0$ durumu (Karaoğlu, 1998)

Klasik çözümde $E<V_0$ olduğunda parçacık ikinci bölgeye kesinlikle giremiyordu. Oysa şimdi 2. bölgede $e^{-\delta x}$ dalga fonksiyonu, dolayısıyla $|\psi|^2 = e^{-2\delta x}$ olasılık yoğunluğu oluştuğunu görüyoruz. Bu bir çelişki midir? Hayır, çünkü gerçek bir deneyde ölçme aleti parçacık boyutlarına göre basamaktan çok uzakta ($x \to +\infty$) bulunacaktır. Bu mesafelerde bulunma olasılığı ise $\lim_{x\to\infty} e^{-2\delta x} \to 0$ olur ve parçacık II. Bölgede gözlenmez.

Bunu görmenin diğer bir yolu, yukarıda tanımlanan yansıma katsayısına bakmaktır:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k-i\delta}{k+i\delta}\right)^2 = \frac{k^2+\delta^2}{k^2+\delta^2} = 1 \tag{1.21}$$

Bu sonuca göre de parçacık mutlaka yansıyacaktır. Potansiyel basamağı için bulunan sonuçlar Şekil 1.5 toplu olarak verilmiştir. Potansiyel basamağı sonsuz ise ne olur? Yukarıdaki sonuçlarda $V_0 \to \infty$ kullanıldığında

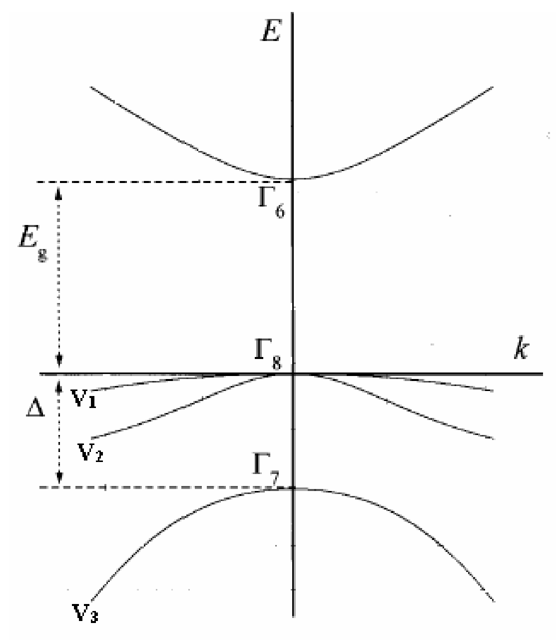
$$\delta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar^2} \to +\infty \ \text{ve } \Psi_{II=0} \tag{1.22}$$

bulunur. Bu sonuç geneldir. Potansiyelin sonsuz olduğu yerde dalga fonksiyonu sıfırdır (Karaoğlu, 1998).

Periyodik cetvelin beşinci ve üçüncü grup elementlerinin çoğu bileşimi Çinko sülfür olarak adlandırılan bir yapı içerisinde kristalize olur. Çinko sülfür yapısı elmas yapısına çok benzer. Her iki örgüde yüzey merkezli kübik (fcc) alt örgülerden oluşur. Ancak, elmasın tersine, Çinko sülfür tipinin örgüsünde bu alt örgüler farklı atomlardan oluşur Zn ve S, In ve Sb, Ga ve As gibi. Her atomun çevresinde karşı cinsten dört atom düzgün bir dörtyüzlünün (tetrahedron yapı) köşelerinde bulunurlar.

Çinko sülfür yapısı için Birinci Brillouin Bölgesi elmasınki ile aynıdır. A^3B^5 tipli bütün yarıiletkenler için Brillouin Bölgesinin merkezi iletkenlik bandının tabanında yer almaz. Örneğin AlSb ve GaP'nin iletim bandının en düşük minimumu [100] yönünde uzanır. Yine de $A^3B^{5'}$ in birçok yarıiletkeni için iletkenlik bantlarının tabanları Brillouin Bölgesinin merkezine, Γ_6 noktasına denk gelmektedir. A^3B^5 tipi yarıiletkenlerden, iletkenlik bantlarının tabanları Γ_6 noktasına karşılık gelenler, InSb tipi yarıiletkenler olarak isimlendirilirler.

InSb için Γ noktası komşuluğunda, bantlara ait dağılım yasası Kane tarafından türetilmiştir. Kane, Löwdin'in yöntemini kullanarak, iletkenlik ve valans bantları V_1, V_2 ,V_3 arasındaki etkileşmeyi dikkate almış, üstte kalan bantların etkisini ise $\vec{k}.\vec{p}$ yöntemi ile hesaplamıştır. Şekil 1.6'da InSb tipi yarıiletkenlere ait enerji bant yapısı verilmiştir. V_1 valans bandı iletkenlik bandı ile etkileşmemektedir. Bu yüzden, bant şekli iletkenlik bandı ile hafif deşik (V_2) ve spin-orbital yarılma deşik (V_3) bantlarının etkileşmesine bağlıdır (Askerov, 1994).



Şekil 1.6 Kane tipi yarıiletkenlere ait bant yapısı

Kane tipli yarıiletkenlerde geçiş katsayısının hesaplanmasını içeren bu çalışma literatürde ilk defa bu tez tarafından incelenmiştir. Bu çalışma diğer çalışmalardan farklı olarak küresel basamak potansiyeli için hazırlanmıştır.

Tez beş bölüm olarak hazırlanmıştır. Giriş bölümünden sonra ikinci bölümde, kaynak özetleri verilmektedir. Üçüncü bölümdeki, materyal ve yöntem kısmında iletkenlik bandı ile valans bant dikkate alınarak tünel olayı araştırıldı. Bu bölümde ilk olarak kullanacağımız yöntem için denklemlerin elde edilmesi ve sonra Kane tipi yarıiletken kuantum noktalarında geçiş katsayısının bulunması üzerinde duruldu. Kullanacağımız yöntem hem çok bantlı durumu dikkate almalı hemde bu yöntem aracılığıyla küresel koordinatlarda bir denkleme ulaşılmalı. Literatürde bunu sağlayan iki yöntem var. Birisi $\vec{k}.\vec{p}$ yöntemi diğeri ise Rotasyon (Dönme) grubuna göre değişmez olan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sistemidir. Bu denklemler sisteminin üstün yanı birçok bant durumu göze alındığında radyal fonksiyonu direkt olarak vermesidir. Bu yüzden tezde rotasyon grubuna göre değişmez kalan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sistemi kullanıldı.

Bulgular kısmında ise potansiyelin sonsuz olması durumunda geçiş katsayısının ifadeleri incelenecektir ve enerji ile değişimi grafik üzerinde gösterilecektir.

Tez çalışması, tartışma ve sonuç bölümünden sonra kaynaklar kısmı ile sona ermektedir.

2. KAYNAK ÖZETİ

Genel olarak elektriksel iletkenlik, elektrik alanını bir kaynak, yük taşıyıcıların hareketini bir tepki olarak gören yaklaşımlardan hesaplanır. Yük taşıyıcıların akışından başlayan ve örneğin kenarlarında sürdürülen ve daha sonra yüklerin nasıl oluştuğunu, alanların nasıl geliştiğini hesaplayan alternatif bir yaklaşım, düzensiz sistemlerin davranışlarının incelenmesinde kabul görmüştür. Landauer, (1987) bu yaklaşıma ait üzerinde az durulmuş sonuçları analiz etmiştir.

Efros ve Rosen, (1998) küresel yarıiletken nanokristallerde elektron ve deşiklerin boyuta göre kuantumlanmış enerji seviyelerinin boyuta bağlı değişimini çalışmışlardır. Çalışmalarında kuantum enerji seviyeleri için iletkenlik ve valans bantlarının etkileşimini dikkate alan ve küresel sekiz bantlı Pidgeon ve Brown modelini içeren analitik bir kuram geliştirmişlerdir. Yasak enerji aralığı küçük olan yarıiletkenlerde bantlar arası etkileşimin muhakkak dikkate alınması gerektiğini göstermişlerdir. Hesaplamalar dar yasak enerji aralıklı InSb için, orta yasak enerji aralıklı CdTe ve geniş yasak enerji aralıklı CdS nanokristalleri için sunulmuştur.

Gashimzade vd., (2000) A^3B^5 ve A^2B^6 tipli yarıiletken küresel kuantum noktalarında serbest yük taşıyıcılarının enerji spektrumlarının kuantum noktalarının yarıçapına bağlılığını çalışmışlardır. Kuantum noktalarında yük taşıyıcıların enerji spektrumunu hesaplamak için rotasyon grubuna göre değişmez kalan denklemlerin elde edilmesinde kullanımlı bir yöntemin üstün yanları gösterilmiştir. Küresel InAs kuantum noktasının ve yasak bant aralığı sıfır olan (HgTe) ve yasak bant aralığı dar olan ($Cd_{1-x}Hg_xTe$; $x<0,16$) kuantum noktalarının enerji özdurumlarının hesaplanması sunulmuştur.

Zakharova ve Chao, (2002) indirekt geçişli heteroyapılarda elektron, hafif ve ağır deşiklerin etkileşmelerinin, bantlar arası tünellemeye ait geçme katsayısı ve akım gerilim karakteristiklerine olan etkisini, manyetik alanın olduğu durumlarda araştırmışlardır. GaSb, AlSb, InAs'den, yapılan çift engel ve engelsiz rezonans tünelleme yapılarını gözönüne almışlardır. Çok bantlı Burt zarf fonksiyonu kuramı ve silindirik yaklaşım kullanarak bulk dağılımları için analitik çözümler bulmuşlardır. Heteroyapıların dalga fonksiyonlarını transfer matris yöntemini kullanarak hesaplamışlardır. Çalışmalarında, farklı Landau seviyelerine sahip durumların etkileşmesini dikkate alarak değişik Landau seviyelerinde ki durumlar arası tünel olayını incelemiş ve geçiş katsayılarını hesaplamışlardır.

Zakharova vd., (2004) farklı bir çalışmalarında InAs/GaSb kuantum kuyularının elektronik bant yapılarını arayüzeylere dik manyetik ve elektrik alan altında araştırmak için saçılma matris yöntemi ve Burt zarf fonksiyonu kuramını uygulamışlardır. InAs ve GaSb yarıiletkenleri üzerinde büyütülen kuantum kuyularını örgü uyumsuzluk zorunu dikkate alarak araştırmışlardır. Landau seviye pozisyonları ve Landau seviyelerine ait spin yarılmalarının örgü uyumsuzluk zoru ve uygulanan gerilime duyarlı olduklarını bulmuşlardır. InAs üzerinde büyütülen yapıya ait en düşük elektron seviyesindeki spin yarılmasının yüksek manyetik alanlarda GaSb üzerinde büyütülene göre daha büyük olduğunu ortaya koymuşlardır.

Gashimzade vd., (2005) sekiz bantlı kane hamiltoniyenlerini kullanarak, bir kare bir de basamak potansiyel bariyeri boyunca parçacığın tünellenmesini çalışmışlardır. Her iki potansiyel için elektronlara ait geçiş olasılığı ve yansıma katsayısı ifadelerini bulmuşlardır. Kane modeli kullanıldığında, engel yüksekliği sonsuz iken bir bantlı modelden farklı olarak geçiş olasılığının sonlu olduğu sonucuna ulaşmışlardır. Ayrıca direnç için Landauer formülünü Kane tipi yarıiletken heteroyapılara uygulamışlardır.

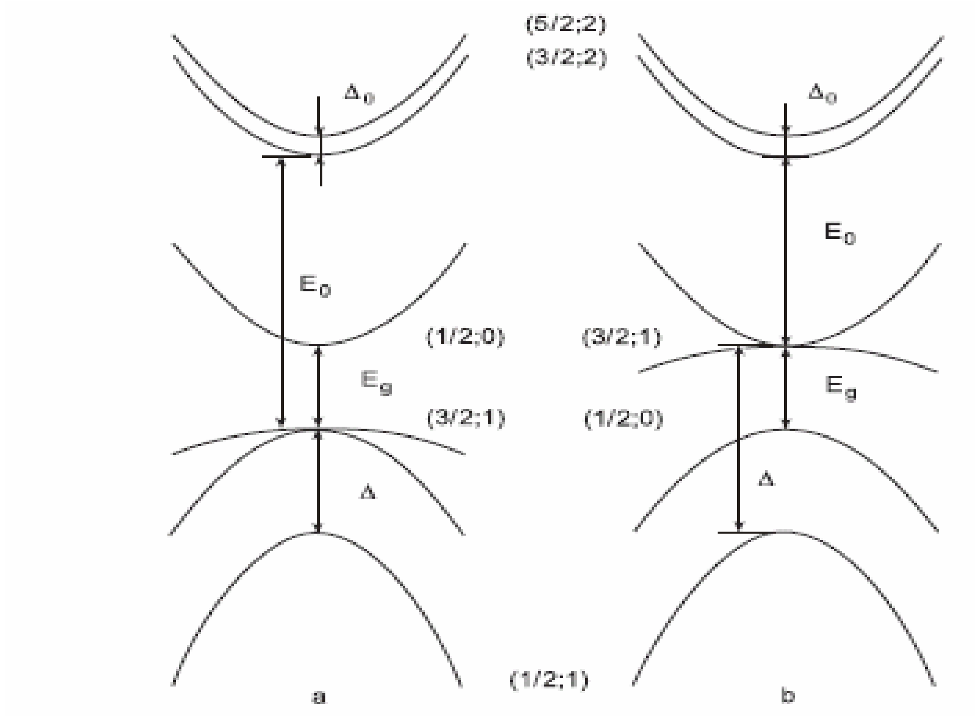
3. MATERYAL ve YÖNTEM

Burada InAs ve HgTe tipli küresel kuantum noktalarında yük taşıyıcıların enerji spektrumları tayin edilecektir. Şekil 3.1 de InAs ve HgTe tipli yarıiletkenlerin Brillouin bölgesi merkezi Γ noktası etrafında bant yapısı gösterilmiştir. Bantları iki simge ile belirticeğiz (l,τ). İlk simge, bantların tam açısal momentum kuantum sayısını, diğer simge bantların numarasını gösterir. InAs tipli yarıiletkenlerde yasak bant aralığının büyüklüğü, spin-yörünge parçalanmasının büyüklüğüne yakın olduğu için aşağıdaki bantların karşılıklı etkileşimini değerlendirmek gerekir. İletkenlik bandı (1/2,0), valans bandı (3/2,1), spin yörünge yarılması neticesinde parçalanmış bant (1/2,1) ve ağır deşiklerin enerji spektrumlarını almak için diğer iki bandı dikkate almak gereklidir: (5/2,2) ve (3/2,2). Yük taşıyıcıların enerji spektrumları hesaplamak için dönme grubunun dönüşümü altında değişmez kalan birinci mertebe diferansiyel denklem sisteminden yararlanılacaktır (Gelfand, 1958; Lyubarskiy, 1957).

Radyal fonksiyonlar için diferansiyel denklemler sistemi aşağıdaki gibidir.

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\tau'} C^{\tau\tau'}_{\ell,\ell-1}\left[\begin{array}{l}
\sqrt{\left(\ell^2-m^2\right)}\dfrac{df^{\ell_0}_{\ell-1,m,\tau'}}{dr}-\dfrac{(\ell-1)\sqrt{\left(\ell^2-m^2\right)}}{r}f^{\ell_0}_{\ell-1,m,\tau'}\\
-\dfrac{1}{2r}\sqrt{(\ell+m-1)(\ell+m)}\sqrt{(\ell_0-m+1)(\ell_0+m)}f^{\ell_0}_{\ell-1,m-1,\tau'}\\
-\dfrac{1}{2r}\sqrt{(\ell-m-1)(\ell-m)}\sqrt{(\ell_0+m+1)(\ell_0-m)}f^{\ell_0}_{\ell-1,m+1,\tau'}
\end{array}\right]+\\
&+C^{\tau\tau'}_{\ell,\ell}\left[\begin{array}{l}
m\dfrac{df^{\ell_0}_{\ell,m,\tau'}}{dr}+\dfrac{m}{r}f^{\ell_0}_{\ell,m,\tau'}\\
+\dfrac{1}{2r}\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}\sqrt{(\ell_0-m+1)(\ell_0+m)}f^{\ell_0}_{\ell,m-1,\tau'}\\
-\dfrac{1}{2r}\sqrt{(\ell+m+1)(\ell-m)}\sqrt{(\ell_0+m+1)(\ell_0-m)}f^{\ell_0}_{\ell,m+1,\tau'}
\end{array}\right]+\\
&+C^{\tau\tau'}_{\ell,\ell+1}\left[\begin{array}{l}
\sqrt{\left((\ell+1)^2-m^2\right)}\dfrac{df^{\ell_0}_{\ell+1,m,\tau'}}{dr}+\dfrac{(\ell+2)\sqrt{\left((\ell+1)^2-m^2\right)}}{r}f^{\ell_0}_{\ell+1,m,\tau'}\\
+\dfrac{1}{2r}\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}\sqrt{(\ell_0-m+1)(\ell_0+m)}f^{\ell_0}_{\ell+1,m-1,\tau'}\\
+\dfrac{1}{2r}\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}\sqrt{(\ell_0+m+1)(\ell_0-m)}f^{\ell_0}_{\ell+1,m+1,\tau'}
\end{array}\right]\\
&+i\chi f^{\ell_0}_{\ell,m,\tau}(r)=0
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

Burada $C_{\ell,\ell}^{\tau\tau'}$ katsayıları sabitlerdir, $f_{\ell,m,\tau}^{\ell_0}(r)$ bulunmak istenen fonksiyonlardır, χ -sabittir. $m = -\ell, -\ell+1, \ldots \ell$, $l_0 \geq l$, ve $-l_0 \leq m$.



Şekil 3.1 InAs (a) ve HgTe (b) tipli yarıiletkenlerin k=0 noktası etrafında bant oluşumu.

(3.1) denklemler sistemi keyfi sayıda bandını dikkate alıp bu bantlardaki yük taşıyıcıların enerji spektrumlarını bulmak için hazır yazılmış diferansiyel denklemler sistemidir.

Verilmiş bantları karakterize eden radyal fonksiyonlar için birinci mertebe diferansiyel denklemler, (3.1) sisteminden yararlanarak yazılır. Ancak bu tez çalışmasında 2 numaralı bantlar ihmal edildi.

$$C^{0,1}_{1/2,1/2}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d}{dr}+\frac{1}{r}\right)f^{\ell 0}_{1/2,1/2,1}+\frac{\ell_0+1/2}{2r}f^{\ell 0}_{1/2,-1/2,1}\right]+$$
$$+C^{0,1}_{1/2,3/2}\left[\begin{array}{l}\sqrt{2}\left(\frac{d}{dr}+\frac{5}{2r}\right)f^{\ell 0}_{3/2,1/2,1}+\sqrt{2}\,\frac{(\ell_0+1/2)}{2r}f^{\ell 0}_{3/2,-1/2,1}+\\ +\frac{\sqrt{2}\alpha}{r}f^{\ell 0}_{3/2,3/2,1}\end{array}\right]+i\chi f^{\ell 0}_{1/2,1/2,0}=0 \tag{3.2}$$

$$C^{0,1}_{1/2,1/2}\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{dr}+\frac{1}{r}\right)f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,1}-\frac{\ell_0+1/2}{2r}f^{\ell_0}_{1/2,1/2,1}\right]+$$
$$+C^{0,1}_{1/2,3/2}\left[\begin{array}{l}\sqrt{2}\left(\frac{d}{dr}+\frac{5}{2r}\right)f^{\ell_0}_{3/2,-1/2,1}+\sqrt{2}\,\frac{(\ell_0+1/2)}{2r}f^{\ell_0}_{3/2,1/2,1}+\\ +\frac{\sqrt{2}\alpha}{r}f^{\ell_0}_{3/2,-3/2,1}\end{array}\right]+ \tag{3.3}$$
$$i\chi f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,0}=0$$

$$C^{1,0}_{3/2,1/2}\left[-\frac{\sqrt{2}\alpha}{r}f^{\ell_0}_{1/2,1/2,0}\right]+i\chi f^{\ell_0}_{3/2,3/2,1}=0$$

$$\tag{3.4}$$

$$C^{1,0}_{3/2,1/2}\left[-\frac{\sqrt{2}\alpha}{r}f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,0}\right]+i\chi f^{\ell_0}_{3/2,-3/2,1}=0 \tag{3.5}$$

$$C^{1,0}_{3/2,1/2}\left[\sqrt{2}\left(\frac{d}{dr}-\frac{1}{2r}\right)f^{\ell_0}_{1/2,1/2,0}-\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{(\ell_0+1/2)}{r}f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,0}\right]+i\chi f^{\ell_0}_{3/2,1/2,1}=0 \tag{3.6}$$

$$C^{1,0}_{3/2,1/2}\left[\sqrt{2}\left(\frac{d}{dr}-\frac{1}{2r}\right)f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,0}-\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{(\ell_0+1/2)}{r}f^{\ell_0}_{1/2,1/2,0}\right]+i\chi f^{\ell_0}_{3/2,-1/2,1}=0 \tag{3.7}$$

$$C^{1,0}_{1/2,1/2}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d}{dr}+\frac{1}{r}\right)f^{\ell_0}_{1/2,1/2,0}+\frac{\ell_0+1/2}{2r}f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,0}\right]+i\chi f^{\ell_0}_{1/2,1/2,1}=0 \tag{3.8}$$

$$C^{1,0}_{1/2,1/2}\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{dr}+\frac{1}{r}\right)f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,0}-\frac{\ell_0+1/2}{2r}f^{\ell_0}_{1/2,1/2,0}\right]+i\chi f^{\ell_0}_{1/2,-1/2,1}=0 \tag{3.9}$$

Burada,

$$\alpha=\frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{\left(\ell_0+\frac{3}{2}\right)\left(\ell_0-\frac{1}{2}\right)} \tag{3.10}$$

şeklinde tanımlıdır.

Denklemler sistemini yazarken simgeler öyle seçilmiştir ki, onların uygun olarak s, p hallerinden geldikleri açıkça görünür. τ=0 ve τ=1 açısal momentum kuantum sayılarının değerleri 0, 1 değerlerine uygundur. Bir numaralı bantların etkileşimi dikkate alınarak, (3.2) ve (3.3), (3.4) ve (3.5), (3.6) ve (3.7), (3.8) ve (3.9) denklemlerini toplayıp çıkarırsak tek ve çift haller için diferansiyel denklemleri elde ederiz.

$$\begin{aligned}&\frac{-ia}{2\left(E-E_g\right)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\mp\left(l_0+1/2\right)}{r}\right]f_3^{\mp}-\\&\frac{i\sqrt{2}b}{\left(E-E_g\right)}\left\{\left[\frac{d}{dr}+\frac{5\pm\left(l_0+1/2\right)}{2r}\right]f_2^{\pm}+\frac{\alpha}{r}f_1^{\pm}\right\}+f_0^{\pm}=0\end{aligned} \tag{3.11}$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{\alpha}{r}f_0^{\pm}+f_1^{\pm}=0 \tag{3.12}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{1\pm\left(l_0+1/2\right)}{2r}\right]f_0^{\pm}+f_2^{\pm}=0 \tag{3.13}$$

$$-\frac{ia}{2\left(E+\Delta\right)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\mp\left(l_0+1/2\right)}{r}\right]f_0^{\mp}+f_3^{\pm}=0 \tag{3.14}$$

Burada aşağıdaki notasyonlar kabul edilmiştir.

$$f_0^{\pm}=f^{l_0}_{1/2,1/2,0}\pm f^{l_0}_{1/2,-1/2,0} \tag{3.15}$$

$$f_1^{\pm}=f^{l_0}_{3/2,3/2,1}\pm f^{l_0}_{3/2,-3/2,1} \tag{3.16}$$

$$f_2^{\pm}=f^{l_0}_{3/2,1/2,1}\pm f^{l_0}_{3/2,-1/2,1} \tag{3.17}$$

$$f_3^{\pm}=f^{l_0}_{1/2,1/2,1}\pm f^{l_0}_{1/2,-1/2,1} \tag{3.18}$$

$$\frac{C^{0,1}_{1/2,1/2}}{i\chi} = -\frac{ia}{E - E_g}; \quad \frac{C^{1,0}_{1/2,1/2}}{i\chi} = \frac{ia}{E + \Delta}; \tag{3.19}$$

$$\frac{C^{0,1}_{1/2,3/2}}{i\chi} = -\frac{ib}{E - E_g}; \quad \frac{C^{1,0}_{3/2,1/2}}{i\chi} = -\frac{ib}{E}; \tag{3.20}$$

Denklem (3.19) ve (3.20)'de E_g yasak enerji aralığı, Δ-spin-yörünge parçalanması, a ve b, parametreleri iletkenlik ve valans bantları arasındaki momentum operatörünün matris elemanlarıdır. Denklemler sistemi tek ve çift haller için ayrıca yazılmıştır. (3.11)- (3.14) denklemleri elektronların, hafif deşiklerin, ve spin-yörünge parçalanmış deşiklerin enerji spektrumlarını bulmaya imkan verir. (Gelfand vd., 1958)

Bu çalışmada iletkenlik bandı (1/2,0), valans bandı (3/2,1), spin yörünge yarılması neticesinde parçalanmış bandı (1/2,1) göz önüne alındı.

$$\begin{aligned} &\frac{-ia}{2(E-E_g)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{1 \mp (l_0 + \frac{1}{2})}{r}\right] f_3^{\mp} \\ &-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\left\{\left[\frac{d}{dr} + \frac{5 \pm (l_0 + \frac{1}{2})}{2r}\right] f_2^{\pm} + \frac{\alpha}{r} f_1^{\pm}\right\} + f_0^{\pm} = 0 \end{aligned} \tag{3.11}$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{\alpha}{r} f_0^{\pm} + f_1^{\pm} = 0 \tag{3.12}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{1 \pm (l_0 + 1/2)}{2r}\right] f_0^{\pm} + f_2^{\pm} = 0 \tag{3.13}$$

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{1 \mp (l_0 + \frac{1}{2})}{r}\right] f_0^{\mp} + f_3^{\pm} = 0 \tag{3.14}$$

Denklem (3.12), (3.13) ve (3.14) den $f_1^{\pm}$, $f_2^{\pm}$, $f_3^{\pm}$ çekilerek,

$$f_1^{\pm} = -\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{\alpha}{r} f_0^{\pm} \tag{3.21}$$

$$f_2^{\pm} = \frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{1 \pm (l_0 + \frac{1}{2})}{2r}\right] f_0^{\pm} \tag{3.22}$$

$$f_3^{\pm} = \frac{ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{1 \mp (l_0 + \frac{1}{2})}{r}\right] f_0^{\mp} \tag{3.23}$$

Denklem (3.11)'de yerleştirilerek;

$$\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\pm(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_0^{\pm}+$$
$$\frac{2b^2}{E(E-E_g)}\left\{\left[\frac{d}{dr}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\right]\left[\frac{d}{dr}-\frac{1\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\right]f_0^{\pm}-\frac{\alpha^2}{r^2}f_0^{\pm}\right\}+f_0^{\pm}=0 \tag{3.24}$$

Denklem (3.24)'i düzenlersek, tek ve çift durumları içeren küresel Bessel diferansiyel denklemini elde edilir.

$$\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{1\pm(l_0+\frac{1}{2})}{r^2}+\frac{1\pm(l_0+\frac{1}{2})}{r}\frac{d}{dr}+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(1\mp(l_0+\frac{1}{2}))}{r^2}\right]f_0^{\pm}$$
$$+\frac{2b^2}{E(E-E_g)}\left\{\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r^2}-\frac{1\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\frac{d}{dr}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\frac{d}{dr}-\frac{(5\pm(l_0+\frac{1}{2}))(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))}{4r^2}\right]f_0^{\pm}-\frac{\alpha^2}{r^2}f_0^{\pm}\right\} \tag{3.25}$$
$$+f_0^{\pm}=0$$

$$\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(1\mp(l_0+\frac{1}{2})-1)}{r^2}\right]f_0^{\pm}+$$
$$\frac{2b^2}{E(E-E_g)}\left\{\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(2-5\mp(l_0+\frac{1}{2}))}{4r^2}\right]f_0^{\pm}-\frac{\alpha^2}{r^2}f_0^{\pm}\right\}+f_0^{\pm}=0 \tag{3.26}$$

$$\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(\mp(l_0+\frac{1}{2}))}{r^2}\right]f_0^{\pm}+$$
$$\frac{2b^2}{E(E-E_g)}\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(-3\mp(l_0+\frac{1}{2}))-4\alpha^2}{4r^2}\right\}f_0^{\pm}+f_0^{\pm}=0 \tag{3.27}$$

Denklem (3.27)'de α'nın değeri yerine konulup denklem düzenlenirse;

$$\alpha=\frac{\sqrt{3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})}}{2} \tag{3.10}$$

$$\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(\mp(l_0+\frac{1}{2}))}{r^2}\right]f_0^{\pm}+$$
$$\frac{2b^2}{E(E-E_g)}\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(\mp(l_0+\frac{1}{2}))}{r^2}\right\}f_0^{\pm}+f_0^{\pm}=0 \tag{3.28}$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{(1\pm(l_0+\frac{1}{2}))(\mp(l_0+\frac{1}{2}))}{r^2}\right]\left[\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}+\frac{2b^2}{E(E-E_g)}\right]f_0^{\pm}+f_0^{\pm}=0 \tag{3.29}$$

$$\frac{d^2f_0^{\pm}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_0^{\pm}}{dr}+\left(K^2+\frac{[1\pm(l_0+\frac{1}{2})][\mp(l_0+\frac{1}{2})]}{r^2}\right)f_0^{\pm}=0 \tag{3.30}$$

Denklem (3.30)'da $x=l_0+\frac{1}{2}$ olmak üzere;

$$\frac{d^2 f_0^{\pm}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_0^{\pm}}{dr}+\left(K^2+\frac{[1\pm x][\mp x]}{r^2}\right)f_0^{\pm}=0 \tag{3.31}$$

şeklinde yazabilir. Denk.(3.31) çift ve tek durumlar için ayrı ayrı inceleyelim. Çift durumlar için,

$$\frac{d^2 f_0^{+}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_0^{+}}{dr}+\left(K^2+\frac{[1+x][-x]}{r^2}\right)f_0^{+}=0 \tag{3.32}$$

$$x+1=-l$$
$$x=-l-1$$

$$\frac{d^2 f_0^{+}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_0^{+}}{dr}+\left(K^2-\frac{l[l+1]}{r^2}\right)f_0^{+}=0 \tag{3.33}$$

Tek durumlar için,

$$\frac{d^2 f_0^{-}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_0^{-}}{dr}+\left(K^2+\frac{[1-x][+x]}{r^2}\right)f_0^{-}=0 \tag{3.34}$$

$$1-x=-l$$
$$-x=-l-1$$
$$x=l+1$$

$$\frac{d^2 f_0^{-}}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df_0^{-}}{dr}+\left(K^2-\frac{l[l+1]}{r^2}\right)f_0^{-}=0 \tag{3.35}$$

Denklem (3.30)' de K^2 ifadesi aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$K^2=\left(\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)}+\frac{2b^2}{E\left(E-E_g\right)}\right)^{-1}=\frac{4E(E-E_g)(E+\Delta)}{a^2E+8b^2(E+\Delta)} \tag{3.36}$$

Denklem (3.33) ve Denklem (3.35) Küresel Bessel Diferansiyel Denklemleridir. Çözümü Bessel fonksiyonları ile aşağıdaki gibi ifade olunur.

$$f_0^{\pm}=C_0^{\pm}\frac{I_{l_0\pm½+½}(Kr)}{r^{½}} \tag{3.37}$$

Denklem (3.37)'de $I_{l_0\pm½+½}(Kr)$ Bessel fonksiyonları ile küresel $J_l(Kr)$ Bessel fonksiyonları arasında aşağıdaki ifade mevcuttur.

$$J_l(x)=\sqrt{\frac{\pi}{2x}}I_{l+½}(x) \tag{3.38}$$

ilişkisi vardır. Denk. (3.33) ve Denk. (3.35) diferansiyel denkleminin çözümü,

$$f_0^{\pm}=\sqrt{\frac{2Kr}{\pi}}\frac{J_{l_0\pm½}}{r^{½}}=C_0^{\pm}J_{l_0\pm½} \tag{3.39}$$

olarak verilir. Aynı yöntemle $f_1^{\pm}$ ve $f_3^{\pm}$ için çözümler;

$$f_1^{\pm} = \frac{C_1^{\pm}}{r} J_{l_0 \pm 1/2} \tag{3.40}$$

$$f_3^{\pm} = C_3^{\pm} J_{l_0 \pm 1/2} \tag{3.41}$$

şeklinde bulunur. $f_2^{\pm}$ için çözümünü $f_1^{\pm}$ aracılığıyla bulabiliriz. Denk. (3.12) den $f_0^{\pm}$'ı çekip Denk. (3.13)'de yerine koyarsak $f_1^{\pm}$ ve $f_2^{\pm}$'ye bağlı bir ifade elde ederiz.

$$f_0^{\pm} = -\frac{Er}{i\sqrt{2}b\alpha} f_1^{\pm} \tag{3.42}$$

$$\frac{-i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{1 \pm \left(l_0 + \frac{1}{2}\right)}{2r}\right]\left(-\frac{Er}{i\sqrt{2}b\alpha} f_1^{\pm}\right) + f_2^{\pm} = 0 \tag{3.43}$$

$$\frac{-i\sqrt{2}b}{E}\left(-\frac{E}{i\sqrt{2}b}\right)\left[\frac{d}{dr} - \frac{1 \pm \left(l_0 + \frac{1}{2}\right)}{2r}\right]\frac{r}{\alpha} f_1^{\pm} + f_2^{\pm} = 0 \tag{3.44}$$

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{1 \mp \left(l_0 + \frac{1}{2}\right)}{2r}\right] f_1^{\pm} + \frac{\sqrt{3\left(l_0 + 3/2\right)\left(l_0 - 1/2\right)}}{2r} f_2^{\pm} = 0 \tag{3.45}$$

Denklem (3.45) kullanılarak $f_2^{\pm}$'yi elde edebiliriz. Bu işleme geçmeden önce Bessel fonksiyonları için türev ifadeleri,

$$(2n+1) f_n(x) = \rho\left(f_{n+1}(x) + f_{n-1}(x)\right) \tag{3.46}$$

$$f_{l-1} = \frac{df_l}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} f_l \tag{3.47}$$

$$f_l = -\frac{df_{l-1}}{d\rho} + \frac{l-1}{\rho} f_{l-1} \tag{3.48}$$

$$f_{l+1} = -\frac{df_l}{d\rho} + \frac{l}{\rho} f_l \tag{3.49}$$

şeklindedir. (Abramovitz ve Stegun., 1972)

(3.46)-(3.49) denklemleri kullanılarak, $f_1^{\pm}$' düzenlenebilir. Bu çalışmada yapılan işlemlerde $\rho = Kr$ olarak tanımlıdır. Denk. (3.37)'e göre;

$$f_1^{\pm} = \frac{C_1^{\pm}}{r} J_{l_0 \pm 1/2} = C_1^{\pm} \frac{1}{r} \frac{\rho}{2(l_0 \pm 1/2) + 1}\left[j_{l_0 + 1 \pm 1/2}(\rho) + j_{l_0 - 1 \pm 1/2}(\rho)\right] \tag{3.50}$$

$$f_1^{\pm} = C_1^{\pm}\frac{1}{r}\frac{Kr}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left[j_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + j_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right] \quad (3.51)$$

$$f_1^{\pm} = \frac{C_1^{\pm}K}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left[j_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + j_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right] \quad (3.52)$$

$C_2^{\pm} = C_1^{\pm}K$ olmak üzere yeniden tanımlanırsa,

$$f_1^{\pm} = \frac{C_2^{\pm}}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left[j_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + j_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right] \quad (3.53)$$

$f_1^{\pm}$'in ifadesini elde edilir. Denk. (3.45) yardımıyla $f_2^{\pm}$ tanımlanabilir;

$$\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left(\begin{array}{l} -K\dfrac{l_0+2\pm 1/2}{Kr}J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + KJ_{l_0\pm 1/2}(Kr) + \\ K\dfrac{l_0-1\pm 1/2}{Kr}J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr) - KJ_{l_0\pm 1/2}(Kr) + \\ \dfrac{1\mp(l_0+1/2)}{2r}\left[J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right] \end{array}\right) = -\tfrac{\alpha}{r}f_2^{\pm} \quad (3.54)$$

$$\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left\{\begin{array}{l} \left(\dfrac{-l_0-2\mp 1/2}{r} + \dfrac{1\mp(l_0+1/2)}{2r}\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + \\ \left(\dfrac{l_0-1\pm 1/2}{r} + \dfrac{1\mp(l_0+1/2)}{2r}\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr) \end{array}\right\} = -\frac{\alpha}{r}f_2^{\pm} \quad (3.55)$$

$$\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left\{\left(\frac{-2l_0 \mp l_0 - 3\mp 3/2}{2r}\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + \left(\frac{2l_0 \mp l_0 - 1\pm 1/2}{2r}\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\} = -\frac{\alpha}{r}f_2^{\pm} \quad (3.56)$$

$$f_2^{\pm} = -\frac{r}{\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left\{\left(\frac{-2l_0 \mp l_0 - 3\mp 3/2}{2r}\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + \left(\frac{2l_0 \mp l_0 - 1\pm 1/2}{2r}\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\} \quad (3.57)$$

$$f_2^{\pm} = \frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0 \pm 1/2)+1}\left\{(2\pm 1)(l_o + 3/2)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr) + (2\mp 1)(1/2 - l_o)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\} \quad (3.58)$$

şeklinde elde edilir.

Elde edilen bu çözümler Denk. (3.11), (3.12), (3.13) ve (3.14) de yerine yazılır. Denk. (3.11)'de bulunan çözümlerin yerlerine yazılması ile,

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_3^{\mp} - \frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\left\{\left[\frac{d}{dr} + \frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\right]f_2^{\pm} + \frac{\alpha}{r}f_1^{\pm}\right\} + f_0^{\pm} = 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]C_3^{\mp}J_{l_0\mp 1/2}(Kr)$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\left\{\begin{array}{l}\left[\frac{d}{dr}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\right]\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)(l_o+3/2)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)(1/2-l_o)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}\\+\frac{\alpha}{r}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left[J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right]\end{array}\right\} \quad (3.59)$$
$$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}(Kr)=0$$

denklemi elde edilir. Denk. (3.59) basitlik açısından iki bölümde incelenecektir. Öncelikle denklemin ilk kısmı için genel bir ifade,

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]C_3^{\mp}J_{l_0\mp 1/2}(Kr) \quad (3.60)$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{\mp}\left[K\frac{l_0\mp 1/2}{Kr}J_{l_0\mp 1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1\mp 1/2}(Kr)+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}J_{l_0\mp 1/2}(Kr)\right] \quad (3.61)$$

şeklinde elde edilir.

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\left\{\begin{array}{l}\left[\frac{d}{dr}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\right]\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)(l_o+3/2)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)(1/2-l_o)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}\\+\frac{\alpha}{r}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left[J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right]\end{array}\right\} \quad (3.62)$$
$$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\left\{\begin{array}{l}\left[K\frac{d}{d\rho}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\right]\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)(l_o+3/2)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)(1/2-l_o)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}\\+\frac{\alpha}{r}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left[J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right]\end{array}\right\} \quad (3.63)$$
$$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}=0$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\left\{\begin{array}{l}K\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left(\begin{array}{l}(2\pm1)(l_0+3/2)\left\{-\frac{l_0+2\pm 1/2}{Kr}J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+J_{l_0\pm 1/2}(Kr)\right\}\\+(2\mp1)(1/2-l_0)\left\{\frac{l_0-1\pm 1/2}{Kr}J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)-J_{l_0\pm 1/2}(Kr)\right\}\end{array}\right)\\+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)(l_o+3/2)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)(1/2-l_o)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}\\+\frac{\alpha}{r}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left[J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right]\end{array}\right\} \quad (3.64)$$
$$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}=0$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm \frac{1}{2})+1}\left\{ \begin{array}{l} \left(\begin{array}{l} (2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})\left\{-\frac{l_0+2\pm\frac{1}{2}}{r}J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)+KJ_{l_0\pm\frac{1}{2}}(Kr)\right\} \\ +(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)\left\{\frac{l_0-1\pm\frac{1}{2}}{r}J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0\pm\frac{1}{2}}(Kr)\right\} \end{array}\right) \\ +\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})}{2r}\left\{(2\pm1)(l_o+\frac{3}{2})J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)+(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_o)J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\right\} \\ +\frac{2\alpha^2}{r}\left[J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)+J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\right] \end{array}\right\} \tag{3.65}$$

$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm\frac{1}{2}}=0$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm \frac{1}{2})+1}\left\{ \left(\begin{array}{l} J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\left(\frac{(-2l_0-4\mp1)(2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})}{2r}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})(2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})}{2r}\right)+ \\ J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\left(\frac{(2l_0-2\pm1)(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)}{2r}+\frac{5\pm(l_0+\frac{1}{2})(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)}{2r}\right) \\ +\frac{3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})}{2r}\left[J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)+J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\right]+ \\ K\left((2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})-(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)\right)J_{l_0\pm\frac{1}{2}}(Kr) \end{array}\right)\right\} \tag{3.66}$$

$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm\frac{1}{2}}=0$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm \frac{1}{2})+1}\left\{ \left(\begin{array}{l} J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\left(\frac{(2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})(-2l_0-4\mp1+5\pm l_0\pm\frac{1}{2})}{2r}+\frac{3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})}{2r}\right)+ \\ J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\left(\frac{(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)(2l_0-2\pm1+5\pm l_0\pm\frac{1}{2})}{2r}+\frac{3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})}{2r}\right) \\ +K\left((2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})-(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)\right)J_{l_0\pm\frac{1}{2}}(Kr) \end{array}\right)\right\} \tag{3.67}$$

$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm\frac{1}{2}}=0$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm \frac{1}{2})+1}\left\{ \left(\begin{array}{l} J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\left(\frac{(2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})(-2l_0\mp1+1\pm l_0\pm\frac{1}{2})}{2r}+\frac{3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})}{2r}\right)+ \\ J_{l_0-1\pm\frac{1}{2}}(Kr)\left(\frac{(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)(2l_0\pm1+3\pm l_0\pm\frac{1}{2})}{2r}+\frac{3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})}{2r}\right) \\ +K\left((2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})-(2\mp1)(\frac{1}{2}-l_0)\right)J_{l_0\pm\frac{1}{2}}(Kr) \end{array}\right)\right\} \tag{3.68}$$

$+C_0^{\pm}J_{l_0\pm\frac{1}{2}}=0$

Denklem (3.68) çift ve tek durumlar için incelenirse;

$(2\pm1)(l_0+\frac{3}{2})(-2l_0\mp1+1\pm l_0\pm\frac{1}{2})+3(l_0+\frac{3}{2})(l_0-\frac{1}{2})$ denklemi için çift durumlar hesaplanır;

$$\begin{aligned} &(3l_0+\tfrac{9}{2})(-l_0+\tfrac{1}{2})+3(l_0+\tfrac{3}{2})(l_0-\tfrac{1}{2}) \\ &(3l_0+\tfrac{9}{2})(-l_0+\tfrac{1}{2}+l_0-\tfrac{1}{2})=0 \end{aligned} \tag{3.69}$$

tek durumlar için hesaplanır;

$$(l_0+3/2)(-3l_0+\tfrac{3}{2})+(l_0+\tfrac{3}{2})(3l_0-3/2)$$
$$(l_0+3/2)(-3l_0+\tfrac{3}{2}+3l_0-3/2)=0 \qquad (3.70)$$

$(2\mp1)(1/2-l_0)(2l_0\pm1+3\pm l_0\pm\tfrac{1}{2})+3(l_0+\tfrac{3}{2})(l_0-1/2)$ denklemi için tek durumlar hesaplanır;

$$(1/2-l_0)(2l_0+3\pm1\pm l_0\pm\tfrac{1}{2})+3(l_0+\tfrac{3}{2})(l_0-1/2)$$
$$(1/2-l_0)(3l_0+\tfrac{9}{2})+(l_0-1/2)(3l_0+\tfrac{9}{2}) \qquad (3.71)$$
$$(3l_0+\tfrac{9}{2})(1/2-l_0+l_0-1/2)=0$$

çift durumlar için hesaplanır;

$$(3/2-3l_0)(2l_0+3\pm1\pm l_0\pm\tfrac{1}{2})+3(l_0+\tfrac{3}{2})(l_0-1/2)$$
$$(3/2-3l_0)(l_0+\tfrac{3}{2})+(l_0+3/2)(3l_0-\tfrac{3}{2}) \qquad (3.72)$$
$$(l_0+\tfrac{3}{2})(3/2-3l_0+3l_0-3/2)=0$$

Denklem (3.68) için en sade ifade ise,

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm1/2)+1}\left\{K\left((2\pm1)(l_0+3/2)-(2\mp1)(1/2-l_0)\right)\right\}J_{l_0\pm1/2}(Kr)+C_0^{\pm}J_{l_0\pm1/2}=0 \qquad (3.73)$$

Buradan, Denk. (3.59) için en genel ifade,

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{\mp}\left[K\frac{l_0\mp1/2}{Kr}J_{l_0\mp1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1\mp1/2}(Kr)+\frac{1\mp(l_0+\tfrac{1}{2})}{r}\right]J_{l_0\mp1/2}(Kr)$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm1/2)+1}\left\{K\left((2\pm1)(l_0+3/2)-(2\mp1)(1/2-l_0)\right)\right\}J_{l_0\pm1/2}(Kr)+C_0^{\pm}J_{l_0\pm1/2}=0 \qquad (3.74)$$

Denklem (3.12)’de bulunan çözümlerin yerleştirilmesi ile genel ifade elde edilir. Elde edilen denklem ise;

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{\alpha}{r}f_0^{\pm}+f_1^{\pm}=0 \qquad (3.12)$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{\alpha}{r}C_0^{\pm}J_{l_0\pm1/2}+C_1^{\pm}\frac{1}{r}J_{l_0\pm1/2}=0 \qquad (3.75)$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\alpha C_0^{\pm}+C_1^{\pm}=0 \qquad (3.76)$$

şeklindedir.

Denklem (3.13)’de bulunan çözümlerin yerleştirilmesi ile genel ifade elde edilir. Elde edilen denklem ise;

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{1\pm\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]f_0^{\pm}+f_2^{\pm}=0 \tag{3.13}$$

$$\frac{-i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{1\pm\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]C_0^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)\left(l_o+3/2\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)\left(1/2-l_o\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}=0 \tag{3.77}$$

$$\frac{-i\sqrt{2}b}{E}\left[K\frac{d}{d\rho}-\frac{1\pm\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]C_0^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)\left(l_o+3/2\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)\left(1/2-l_o\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}=0 \tag{3.78}$$

$$\begin{aligned}&\frac{-i\sqrt{2}b}{E}C_0^{\pm}\left[K\frac{l_0\pm\frac{1}{2}}{Kr}J_{l_0\pm 1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)-\frac{1\pm\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}J_{l_0\pm 1/2}(Kr)\right]\\&+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)\left(l_o+3/2\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)\left(1/2-l_o\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}=0\end{aligned} \tag{3.79}$$

$$\begin{aligned}&\frac{-i\sqrt{2}b}{E}C_0^{\pm}\left[\frac{2l_0\pm1-1\mp\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}J_{l_0\pm 1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)\right]\\&+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{\pm}}{2(l_0\pm 1/2)+1}\left\{(2\pm1)\left(l_o+3/2\right)J_{l_0+1\pm 1/2}(Kr)+(2\mp1)\left(1/2-l_o\right)J_{l_0-1\pm 1/2}(Kr)\right\}=0\end{aligned} \tag{3.80}$$

şeklindedir.

Denklem (3.14)'de bulunan çözümlerin yerleştirilmesi ile genel ifade elde edilir. Denklem ise;

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_0^{\mp}+f_3^{\pm}=0 \tag{3.14}$$

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^{\mp}\left[K\frac{l_0\mp\frac{1}{2}}{Kr}J_{l_0\mp 1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1\mp 1/2}(Kr)+\frac{1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{r}J_{l_0\mp 1/2}(Kr)\right]+C_3^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}(Kr)=0 \tag{3.81}$$

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^{\mp}\left[K\frac{l_0\mp\frac{1}{2}+1\mp(l_0+\frac{1}{2})}{Kr}J_{l_0\mp 1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1\mp 1/2}(Kr)\right]+C_3^{\pm}J_{l_0\pm 1/2}(Kr)=0 \tag{3.82}$$

Denklem (3.74), (3.76), (3.80) ve (3.82) ifadelerini tek ve çift durumlar için araştırırsak, her iki durum da Bessel fonksiyonlarını içeren ifadeler sadeleşir ve K'ya bağlı bir H hamiltoniyen ifadesi ve katsayılara bağlı terimler bulunur. Bu aşamada çift durumlar için denklemler en sade biçimde yazılır,

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^-\left[K\frac{l_0-\frac{1}{2}}{Kr}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+1-\frac{1}{2}}(Kr)+\frac{1-(l_0+\frac{1}{2})}{r}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2(l_0+\frac{1}{2})+1}\{K((2+1)(l_0+\tfrac{3}{2})-(2-1)(\tfrac{1}{2}-l_0))\}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^+J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.83}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^-\left[K\frac{l_0-\frac{1}{2}}{Kr}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+1-\frac{1}{2}}(Kr)+\frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2(l_0+\frac{1}{2})+1}\{K((3l_0+\tfrac{9}{2})-(\tfrac{1}{2}-l_0))\}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^+J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.84}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^-\left[-KJ_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2l_0+2}\{K((3l_0+\tfrac{9}{2}-\tfrac{1}{2}+l_0))\}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^+J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.85}$$

$$\frac{ia}{2(E-E_g)}C_3^-K-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{C_2^+}{\alpha}K+C_0^+=0 \tag{3.86}$$

Denklem (3.86) ifadesi çift durumlar için (3.74) ifadesinden elde edilir.

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\alpha C_0^++C_1^+=0 \tag{3.87}$$

Denklem (3.87) ifadesi çift durumlar için (3.76) ifadesinden elde edilir.

$$\frac{-i\sqrt{2}b}{E}C_0^+\left[\frac{2l_0+1-1-(l_0+\frac{1}{2})}{2r}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+1+\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2(l_0+\frac{1}{2})+1}\{(2+1)(l_o+\tfrac{3}{2})J_{l_0+1\pm\frac{1}{2}}(Kr)+(2-1)(\tfrac{1}{2}-l_o)J_{l_0-1+\frac{1}{2}}(Kr)\}=0 \tag{3.88}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^+\left[\frac{2l_0+1-1-(l_0+\frac{1}{2})}{2r}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2l_0+2}\{(3l_o+\tfrac{9}{2})J_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+(\tfrac{1}{2}-l_o)J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\}=0 \tag{3.89}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^+\left[\frac{l_0-\frac{1}{2}}{2r}\frac{\rho}{2l_0+2}(J_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr))-KJ_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2l_0+2}\{(3l_o+\tfrac{9}{2})J_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+(\tfrac{1}{2}-l_o)J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\}=0 \tag{3.90}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^+K\left[\frac{l_0-\frac{1}{2}-4l_0-4}{2(2l_0+2)}J_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+\frac{l_0-\frac{1}{2}}{2(2l_0+2)}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^+}{2l_0+2}\{(3l_o+\tfrac{9}{2})J_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+(\tfrac{1}{2}-l_o)J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\}=0 \tag{3.91}$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{C_0^{+}K}{2(2l_0+2)}\left[\left(3l_o+\tfrac{9}{2}\right)J_{l_0+3/2}(Kr)+\left(\tfrac{1}{2}-l_o\right)J_{l_0-1/2}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{+}}{2l_0+2}\left\{\left(3l_o+\tfrac{9}{2}\right)J_{l_0+3/2}(Kr)+\left(\tfrac{1}{2}-l_o\right)J_{l_0-1/2}(Kr)\right\}=0 \qquad (3.92)$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{C_0^{+}K}{2(2l_0+2)}\left[\left(3l_o+\tfrac{9}{2}\right)J_{l_0+3/2}(Kr)+\left(\tfrac{1}{2}-l_o\right)J_{l_0-1/2}(Kr)\right]+$$
$$\frac{1}{2(2l_0+2)}\frac{C_2^{+}}{\alpha}\left\{\left(3l_o+\tfrac{9}{2}\right)J_{l_0+3/2}(Kr)+\left(\tfrac{1}{2}-l_o\right)J_{l_0-1/2}(Kr)\right\}=0 \qquad (3.93)$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^{+}K+\frac{C_2^{+}}{\alpha}=0 \qquad (3.94)$$

Denklem (3.80)'den, Denk. (3.94) elde edilir. Denklem (3.94)' de $\frac{C_2^{+}}{\alpha}=C_2^{+}$ olarak kabul edilir.

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^{+}\left[K\frac{2l_0+2}{Kr}J_{l_0+1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1+1/2}(Kr)\right]+C_3^{-}J_{l_0-1/2}(Kr)=0 \qquad (3.95)$$

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^{+}\left[\frac{2l_0+2}{r}\frac{Kr}{2l_0+2}\left[J_{l_0+3/2}(Kr)+J_{l_0-1/2}(Kr)\right]-KJ_{l_0+3/2}(Kr)\right]+C_3^{-}J_{l_0-1/2}(Kr)=0 \qquad (3.96)$$

$$-\frac{ia}{2(E+\Delta)}C_0^{+}KJ_{l_0-1/2}(Kr)+C_3^{-}J_{l_0-1/2}(Kr)=0 \qquad (3.97)$$

$$-\frac{ia}{2(E+\Delta)}C_0^{+}K+C_3^{-}=0 \qquad (3.98)$$

Denklem (3.82)'den, Denk. (3.98) elde edilir.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{i\sqrt{2}bK}{E-E_g} & \frac{iaK}{2(E-E_g)} \\ \frac{i\sqrt{2}b}{E}\alpha & 1 & 0 & 0 \\ \frac{i\sqrt{2}bK}{E} & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{iaK}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_0^{+} \\ C_1^{+} \\ C_2^{+} \\ C_3^{-} \end{pmatrix} \qquad (3.99)$$

Denklem (3.99) çift durumlar için çözümlerin yerine konulması ile elde edilen denklemlerin matris halinde yazılmış ifadesidir. Bu aşamada tek durumlar için matris halinde yazılacak olan denklemler elde edilirse,

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{+}\left[K\frac{l_0+\frac{1}{2}}{Kr}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+1+\frac{1}{2}}(Kr)+\frac{1+(l_0+\frac{1}{2})}{r}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{-}}{2(l_0-\frac{1}{2})+1}\left\{K\left((2-1)(l_0+\frac{3}{2})-(2+1)(\frac{1}{2}-l_0)\right)\right\}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^{-}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.100}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{+}\left[K\frac{l_0+\frac{1}{2}+l_0+\frac{3}{2}}{Kr}J_{l_0+\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+1+\frac{1}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{-}}{2l_0}\left\{K\left(l_0+\frac{3}{2}-\frac{3}{2}+3l_0\right)\right\}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^{-}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.101}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{+}\left[\frac{2l_0+2}{r}\frac{Kr}{2l_0+2}\left[J_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)\right]-KJ_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{-}}{2l_0}\left\{K\left(4l_0\right)\right\}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^{-}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.102}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{+}\left[KJ_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)+KJ_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)-KJ_{l_0+\frac{3}{2}}(Kr)\right]$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{-}}{2l_0}\left\{K\left(4l_0\right)\right\}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^{-}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.103}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{+}KJ_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)$$
$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^{-}}{2l_0}K\left(4l_0\right)J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)+C_0^{-}J_{l_0-\frac{1}{2}}(Kr)=0 \tag{3.104}$$

$$\frac{-ia}{2(E-E_g)}C_3^{+}K-\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}\frac{C_2^{-}}{\alpha}K+C_0^{-}=0 \tag{3.105}$$

Denklem (3.105) ifadesi tek durumlar için (3.74) ifadesinden elde edilir.

Denklem (3.76)’ dan tek durumlar için elde edilen denklem ise;

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\frac{\alpha}{r}C_0^{-}J_{l_0-\frac{1}{2}}+C_1^{-}\frac{1}{r}J_{l_0-\frac{1}{2}}=0 \tag{3.106}$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}\alpha C_0^{-}+C_1^{-}=0 \tag{3.107}$$

Denklem (3.80)’den tek durumlar için elde edilen denklem ise;

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^-\left[\frac{2l_0-1-1+\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}J_{l_0-1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1/2}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^-}{2l_0}\left\{(2-1)(l_o+3/2)J_{l_0+1/2}(Kr)+(2+1)(1/2-l_o)J_{l_0-3/2}(Kr)\right\}=0 \tag{3.108}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^-\left[\frac{3l_0-\frac{3}{2}}{2r}J_{l_0-1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1/2}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^-}{2l_0}\left\{(2-1)(l_o+3/2)J_{l_0+1/2}(Kr)+(2+1)(1/2-l_o)J_{l_0-3/2}(Kr)\right\}=0 \tag{3.109}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^-\left[\frac{3l_0-\frac{3}{2}}{2r}\frac{Kr}{2l_0}\left[J_{l_0+1/2}(Kr)+J_{l_0-3/2}(Kr)\right]-KJ_{l_0+1/2}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^-}{2l_0}\left\{(2-1)(l_o+3/2)J_{l_0+1/2}(Kr)+(2+1)(1/2-l_o)J_{l_0-3/2}(Kr)\right\}=0 \tag{3.110}$$

$$-\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^-K\left[\frac{3l_0-\frac{3}{2}-4l_0}{4l_0}J_{l_0+1/2}(Kr)\frac{3l_0-\frac{3}{2}}{4l_0}J_{l_0-3/2}(Kr)\right]$$
$$+\frac{1}{2\alpha}\frac{C_2^-}{2l_o}\left\{(2-1)(l_o+3/2)J_{l_0+1/2}(Kr)+(2+1)(1/2-l_o)J_{l_0-3/2}(Kr)\right\}=0 \tag{3.111}$$

$$\frac{i\sqrt{2}b}{E}C_0^-K+\frac{C_2^-}{\alpha}=0 \tag{3.112}$$

Denklem (3.82)’den tek durumlar için elde edilen denklem ise;

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^-\left[K\frac{l_0-1/2}{Kr}-KJ_{l_0+1/2}(Kr)+\frac{1-(l_0+1/2)}{r}\right]+C_3^+J_{l_0+1/2}(Kr)=0 \tag{3.113}$$

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^-\left[\frac{l_0-\frac{1}{2}}{r}J_{l_0-1/2}(Kr)-KJ_{l_0+1/2}(Kr)+\frac{1-(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]+C_3^+J_{l_0+1/2}(Kr)=0 \tag{3.114}$$

$$\frac{-ia}{2(E+\Delta)}C_0^-\left[-KJ_{l_0+1/2}(Kr)\right]+C_3^+J_{l_0+1/2}(Kr)=0 \tag{3.115}$$

$$\frac{ia}{2(E+\Delta)}C_0^-K+C_3^+=0 \tag{3.116}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{i\sqrt{2}bK}{E-E_g} & -\frac{iaK}{2(E-E_g)} \\ \frac{i\sqrt{2}b}{E}\alpha & 1 & 0 & 0 \\ \frac{i\sqrt{2}bK}{E} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{iaK}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_0^- \\ C_1^- \\ C_2^- \\ C_3^+ \end{pmatrix} \tag{3.117}$$

Denklem (3.117) tek durumlar için çözümlerin yerine konulması ile elde edilen denklemlerin matris halinde yazılmış ifadesidir. Denk. (3.99) ve Denk. (3.117)'un determinantlarını hesaplarsak, her ikisi içinde aynı sonuca ulaşıldığını görülür. Bu determinantların sonucu ise;

$$1-\frac{a^2K^2}{4(E+\Delta)(E-E_g)}-\frac{2b^2K^2}{E(E-E_g)}=0 \tag{3.118}$$

ifadesidir. Bu ifadeyi düzenlenirse,

$$E(E-E_g)(E+\Delta)-\frac{a^2K^2E}{4}-2b^2K^2(E+\Delta)=0 \tag{3.119}$$

Denklem (3.119) ifadesi taşıyıcıların enerji spektrumu tanımlayan dağılım ifadesidir. Her iki determinantın sonucu Denk. (3.118)'e eşit olduğu için bundan sonraki işlemlerde,

$$H=\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{i\sqrt{2}bK}{E-E_g} & -\frac{iaK}{2(E-E_g)} \\ \frac{i\sqrt{2}b}{E}\alpha & 1 & 0 & 0 \\ \frac{i\sqrt{2}bK}{E} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{iaK}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.120}$$

kabulüyle devam edilir. Kane tipli A ve B materyallerini içeren heteroyapılarda sınır koşulları akımın sürekliliği ile tanımlanır.

$$(J)_A=(J)_B \tag{3.121}$$

Burada J,

$$J=\frac{\partial H}{\partial K} \tag{3.122}$$

olarak tanımlanır. Akım ifadesi ise;

$$J=\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g} & -\frac{ia}{2(E-E_g)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{i\sqrt{2}b}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{ia}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.123}$$

Bu aşamada çift kısımlar için sınır koşullarını ve geçme katsayısını bulalım. Çift durumlar için sınır koşulları;

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\dfrac{i\sqrt{2}b}{E-E_g} & -\dfrac{ia}{2(E-E_g)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dfrac{i\sqrt{2}b}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \dfrac{ia}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_0^{\;+} \\ f_1^{\;+} \\ f_2^{\;+} \\ f_3^{\;-} \end{pmatrix}_A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\dfrac{i\sqrt{2}b}{E-E_g} & -\dfrac{ia}{2(E-E_g)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dfrac{i\sqrt{2}b}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \dfrac{ia}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_0^{\;+} \\ f_1^{\;+} \\ f_2^{\;+} \\ f_3^{\;-} \end{pmatrix}_B \tag{3.124}$$

Çift durumlar için heteroyapıların sağ ve sol kısımlarında akımın sürekli olduğu kullanılırsa iletkenlik bandı zarf fonksiyonları için sınır koşullarını aşağıdaki gibi Denk. (3.124) ifadesinden yazılır.

$$\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}f_2^{\;+}+\frac{ia}{2(E-E_g)}f_3^{\;-}\right)_A=\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}f_2^{\;+}+\frac{ia}{2(E-E_g)}f_3^{\;-}\right)_{\mathbf{B}} \tag{3.125}$$

$$\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}f_0^{\;+}\right)_A=\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}f_0^{\;+}\right)_B \text{ ve}\left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}f_0^{\;+}\right)_A=\left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}f_0^{\;+}\right)_B \tag{3.126}$$

Bu denklemleri sadeleştirmek için (3.13) ve (3.14) denklemlerinden yararlanılır.

$$f_{0A}^{\;\;+}=f_{0B}^{\;\;+} \tag{3.127}$$

$$\left(2\sqrt{2}bf_2^{\;+}+af_3^{\;-}\right)_A=\left(2\sqrt{2}bf_2^{\;+}+af_3^{\;-}\right)_{\mathbf{B}} \tag{3.128}$$

$$\begin{aligned}&\left(2\sqrt{2}b\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{1+\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]f_0^{\;+}\right)+a\left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1+(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_0^{\;+}\right)\right)_A=\\&\left(2\sqrt{2}b\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{1+\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]f_0^{\;+}\right)+a\left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{1+(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_0^{\;+}\right)\right)_B\end{aligned} \tag{3.129}$$

$$\begin{aligned}&\left(\frac{4b^2}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{2r}\right]f_0^{\;+}+\frac{a^2}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}\right]f_0^{\;+}\right)_A=\\&\left(\frac{4b^2}{E}\left[\frac{d}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{2r}\right]f_0^{\;+}+\frac{a^2}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}\right]f_0^{\;+}\right)_B\end{aligned} \tag{3.130}$$

Ayrıca bu denklemlerde a=2b ve E=E+E_g kabul edilmiştir. Heteroyapının B bölümü için potansiyel hesaba katılırsa,

$$\left(\frac{4b^2}{E+E_g}\left[\frac{d}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{2r}\right]f_0^{\,+}+\frac{4b^2}{2(E+E_g+\Delta)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}\right]f_0^{\,+}\right)_A = \left(\frac{4b^2}{E+E_g-V}\left[\frac{d}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{2r}\right]f_0^{\,+}+\frac{4b^2}{2(E+E_g+\Delta-V)}\left[\frac{d}{dr}+\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}\right]f_0^{\,+}\right)_B \tag{3.131}$$

Denklem (3.131)'ın her iki tarafını $\frac{2}{4b^2}$ ile çarpılarak,

$$\left(\frac{2}{E+E_g}\left[\frac{d}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{2r}\right]f_0^{\,+}+\frac{1}{E+E_g+\Delta}\left[\frac{d}{dr}+\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}\right]f_0^{\,+}\right)_A = \left(\frac{2}{E+E_g-V}\left[\frac{d}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{2r}\right]f_0^{\,+}+\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\left[\frac{d}{dr}+\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}\right]f_0^{\,+}\right)_B \tag{3.132}$$

$$\left(\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\frac{df_0^{\,+}}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}f_0^{\,+}\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\right)_A = \left(\left(\frac{2}{E+E_g-V}+\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\frac{df_0^{\,+}}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}f_0^{\,+}\left(\frac{1}{E+E_g-V}-\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\right)_B \tag{3.133}$$

Denklem (3.133)'de Bessel fonksiyonları için türev ifadesi olan Denk. (3.47)'yi kullanalım,

$$\left(\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\frac{df_0^{\,+}}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}f_0^{\,+}\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\right)_A = \left(\left(\frac{2}{E+E_g-V}+\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\frac{df_0^{\,+}}{dr}-\frac{l_0+\frac{3}{2}}{r}f_0^{\,+}\left(\frac{1}{E+E_g-V}-\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\right)_B \tag{3.134}$$

$$r=\frac{\rho}{K} \qquad n=l_0+\tfrac{1}{2} \tag{3.135}$$

$$\rho=Kr$$

$$d\rho=Kdr \tag{3.136}$$

$$\frac{d}{d\rho}=\frac{1}{K}\frac{d}{dr}\Rightarrow\frac{d}{dr}=K\frac{d}{d\rho}$$

$$\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right)K\frac{\partial f_{0n}^{\,+}}{\partial\rho}-\frac{(n+1)}{r}f_{0n}^{\,+}\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right) \tag{3.137}$$

$$\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right)K\left(f_{0_{n-1}}{}^{+}-\frac{n+1}{\rho}f_{0_n}{}^{+}\right)$$
$$-\frac{(n+1)}{r}f_{0_n}{}^{+}\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right) \tag{3.138}$$

$$\alpha_A=\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right) \tag{3.139}$$

$$\beta_A=\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right) \tag{3.140}$$

$$\alpha_B=\left(\frac{2}{E+E_g-V}+\frac{1}{(E+E_g+\Delta-V)}\right) \tag{3.141}$$

$$\beta_B=\left(\frac{1}{E+E_g-V}-\frac{1}{(E+E_g+\Delta-V)}\right) \tag{3.142}$$

olmak üzere tanımlanırsa, sınır koşulu ifadesi;

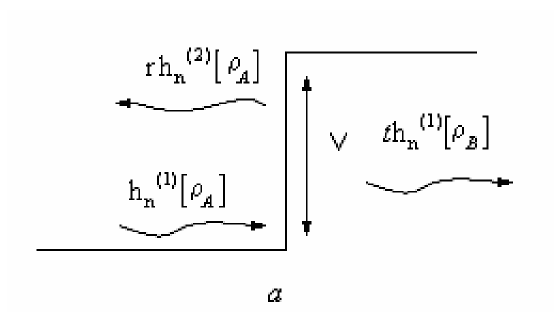
$$\frac{K_A}{\rho_A}\left[\alpha_A\rho_A f_{o_{n-1}}{}^{+}-\alpha_A(n+1)f_{o_n}{}^{+}-\beta_A(n+1)f_{o_n}{}^{+}\right]_A=$$
$$\frac{K_B}{\rho_B}\left[\alpha_B\rho_B f_{o_{n-1}}{}^{+}-\alpha_B(n+1)f_{o_n}{}^{+}-\beta_B(n+1)f_{o_n}{}^{+}\right]_B \tag{3.143}$$

Böylece sınır koşulu ifadelerinin en sade hali aşağıdaki şekilde elde edilir.

$$f_{0A}{}^{+}=f_{0B}{}^{+} \tag{3.144}$$

$$\left[\alpha_A\rho_A f_{o_{n-1}}{}^{+}-\alpha_A(n+1)f_{o_n}{}^{+}-\beta_A(n+1)f_{o_n}{}^{+}\right]_A=$$
$$\left[\alpha_B\rho_B f_{o_{n-1}}{}^{+}-\alpha_B(n+1)f_{o_n}{}^{+}-\beta_B(n+1)f_{o_n}{}^{+}\right]_B \tag{3.145}$$

Elektronun dalga fonksiyonu gelen ve yansıyan kısımlarının toplamı şeklinde yazılabilir.



Şekil 3.2 Gelen ve yansıyan dalgalar

Şekil 3.2'den gelen ve yansıyan dalgalar göz önüne alınarak yazılan dalga fonksiyonlarının sınır koşullarında yerine yazılması ile elde edilen ifadeler ise;

$$h_n^{(1)}[\rho_A]+r h_n^{(2)}[\rho_A]=t h_n^{(1)}[\rho_B] \tag{3.146}$$

$$\begin{aligned}&\alpha_A(\rho_A(h_{n-1}^{(1)}[\rho_A]+r h_{n-1}^{(2)}[\rho_A])-(n+1)(h_n^{(1)}[\rho_A]+r h_n^{(2)}[\rho_A]))-\beta_A(n+1)(h_n^{(1)}[\rho_A]+r h_n^{(2)}[\rho_A]))=\\&\alpha_B t(\rho_B h_{n-1}^{(1)}[\rho_B]-(n+1)h_n^{(1)}[\rho_B])-\beta_B(n+1)t h_n^{(1)}[\rho_B]\end{aligned} \tag{3.147}$$

Denklem (3.146) ve Denk. (3.147)'de $h_n^{(1)}$, $h_n^{(2)}$, $h_{n-1}^{(2)}$, $h_{n-2}^{(2)}$ hankel fonksiyonları ve r, t yansıyan ve geçen için katsayılar, ρ_A ve ρ_B, A ve B materyalleri için elektron momentumlarıdır. Hankel fonksiyonları;

$$\begin{aligned}h_0^{(1)}[\rho]&=j_0[\rho]+iy_0[\rho]=\frac{\sin[\rho]-i\cos[\rho]}{\rho}=-i\frac{e^{i\rho}}{\rho}\\h_0^{(2)}[\rho]&=j_0[\rho]-iy_0[\rho]=\frac{\sin[\rho]+i\cos[\rho]}{\rho}=i\frac{e^{-i\rho}}{\rho}\\h_1^{(1)}[\rho]&=j_1[\rho]+iy_1[\rho]=\frac{\sin[\rho]-i\cos[\rho]}{\rho^2}-\frac{\cos[\rho]+i\sin[\rho]}{\rho}=\left(-i\frac{1}{\rho^2}-\frac{1}{\rho}\right)e^{i\rho}\\h_1^{(2)}[\rho]&=j_1[\rho]-iy_1[\rho]=\frac{\sin[\rho]+i\cos[\rho]}{\rho^2}-\frac{\cos[\rho]-i\sin[\rho]}{\rho}=\left(i\frac{1}{\rho^2}-\frac{1}{\rho}\right)e^{-i\rho}\end{aligned} \tag{3.148}$$

şeklinde tanımlanır. Çift durumlar için n=(l_0 +1/2) → n=1 durumu için geçiş katsayısını hesaplayacağız. Denk. (3.146) ve (3.147)'yi Mathematica programı yardımıyla birlikte çözülür ve çift durumlar için geçiş katsayısı ifadesini elde ederiz.

$$T=\frac{4\alpha_A\alpha_B\rho_A\rho_B}{\left(\left(\frac{\rho_A\alpha_A}{\rho_B}-\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A}-2(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B)\left(\frac{1}{\rho_A\rho_B}+1\right)\right)^2+\left(\rho_A\alpha_A+\rho_B\alpha_B-2(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B)\left(\frac{1}{\rho_A}-\frac{1}{\rho_B}\right)\right)^2\right)} \tag{3.149}$$

Tek durumlar için aynı yöntem uygulanır. Burada tek durumlar için sınır koşullarını;

$$\begin{pmatrix}0 & 0 & -\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g} & -\frac{ia}{2(E-E_g)}\\0 & 0 & 0 & 0\\\frac{i\sqrt{2}b}{E} & 0 & 0 & 0\\\frac{ia}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}f_0^-\\f_1^-\\f_2^-\\f_3^+\end{pmatrix}_A=$$

$$\begin{pmatrix}0 & 0 & -\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g} & -\frac{ia}{2(E-E_g)}\\0 & 0 & 0 & 0\\\frac{i\sqrt{2}b}{E} & 0 & 0 & 0\\\frac{ia}{2(E+\Delta)} & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}f_0^-\\f_1^-\\f_2^-\\f_3^+\end{pmatrix}_B \tag{3.150}$$

Denklem (3.150) aracılığıyla tek durumlar için sınır koşullarının aynı yöntemle elde edilir.

$$\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}f_2^- + \frac{ia}{2(E-E_g)}f_3^+\right)_A = \left(\frac{i\sqrt{2}b}{E-E_g}f_2^- + \frac{ia}{2(E-E_g)}f_3^+\right)_{\mathbf{B}} \tag{3.151}$$

$$\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}f_0^-\right)_A = \left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}f_0^-\right)_B \qquad \left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}f_0^-\right)_A = \left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}f_0^-\right)_B \tag{3.152}$$

Bu denklemleri sadeleştirmek için (3.13) ve (3.14) denklemlerinden yararlanılır.

$$f_{0A}^- = f_{0B}^- \tag{3.153}$$

$$\left(2\sqrt{2}bf_2^- + af_3^+\right)_A = \left(2\sqrt{2}bf_2^- + af_3^+\right)_{\mathbf{B}} \tag{3.154}$$

$$\begin{gathered}\left(2\sqrt{2}b\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{1-\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]f_0^-\right) + a\left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{1-(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_0^-\right)\right)_A = \\ \left(2\sqrt{2}b\left(\frac{i\sqrt{2}b}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{1-\left(l_0+\frac{1}{2}\right)}{2r}\right]f_0^-\right) + a\left(\frac{ia}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{1-(l_0+\frac{1}{2})}{r}\right]f_0^-\right)\right)_B\end{gathered} \tag{3.155}$$

$$\begin{gathered}\left(\frac{4b^2}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{2r}\right]f_0^- + \frac{a^2}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}\right]f_0^-\right)_A = \\ \left(\frac{4b^2}{E}\left[\frac{d}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{2r}\right]f_0^- + \frac{a^2}{2(E+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}\right]f_0^-\right)_B\end{gathered} \tag{3.156}$$

Ayrıca bu denklemlerde a=2b ve E=E+E_g kabul edilir. Heteroyapının B bölümü için potansiyel hesaba katılırsa,

$$\begin{gathered}\left(\frac{4b^2}{E+E_g}\left[\frac{d}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{2r}\right]f_0^- + \frac{a^2}{2(E+E_g+\Delta)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}\right]f_0^-\right)_A = \\ \left(\frac{4b^2}{E+E_g-V}\left[\frac{d}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{2r}\right]f_0^- + \frac{a^2}{2(E+E_g+\Delta-V)}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}\right]f_0^-\right)_B\end{gathered} \tag{3.157}$$

Denklem (3.157)'in her iki tarafını $\dfrac{2}{4b^2}$ ile çarpılarak,

$$\begin{gathered}\left(\frac{2}{E+E_g}\left[\frac{d}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{2r}\right]f_0^- + \frac{1}{E+E_g+\Delta}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}\right]f_0^-\right)_A = \\ \left(\frac{2}{E+E_g-V}\left[\frac{d}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{2r}\right]f_0^- + \frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}\right]f_0^-\right)_B\end{gathered} \tag{3.158}$$

$$\begin{gathered}\left(\left(\frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\frac{df_0^-}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}f_0^-\left(\frac{1}{E+E_g} - \frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\right)_A = \\ \left(\left(\frac{2}{E+E_g-V} + \frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\frac{df_0^-}{dr} - \frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}f_0^-\left(\frac{1}{E+E_g-V} - \frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\right)_B\end{gathered} \tag{3.159}$$

Denklem (3.159)'da Bessel fonksiyonları için türev ifadesi olan Denk. (3.49)'u kullanalım,

$$\left(\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\frac{df_0^-}{dr}-\frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}f_0^-\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{E+E_g+\Delta}\right)\right)_A = \left(\left(\frac{2}{E+E_g-V}+\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\frac{df_0^-}{dr}-\frac{\frac{1}{2}-l_0}{r}f_0^-\left(\frac{1}{E+E_g-V}-\frac{1}{E+E_g+\Delta-V}\right)\right)_B \tag{3.160}$$

$$r=\frac{\rho}{K} \qquad n=\tfrac{1}{2}-l_0 \tag{3.161}$$

$$\rho = Kr$$

$$d\rho = Kdr \tag{3.162}$$

$$\frac{d}{d\rho}=\frac{1}{K}\frac{d}{dr}\Rightarrow\frac{d}{dr}=K\frac{d}{d\rho}$$

$$\left(\frac{2}{E+E_g}+\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right)K\left(\frac{n}{\rho}f_{0_n}^{\;-}-f_{0_{n+1}}^{\;-}\right) - \frac{n}{\rho/K}f_{0_n}^{\;-}\left(\frac{1}{E+E_g}-\frac{1}{(E+E_g+\Delta)}\right) \tag{3.163}$$

$$\frac{K_A}{\rho_A}\left[n\alpha_A f_{o_n}^{\;-}-\rho_A\alpha_A f_{o_{n+1}}^{\;-}-n\beta_A f_{o_n}^{\;-}\right]_A = \frac{K_B}{\rho_B}\left[n\alpha_B f_{o_n}^{\;-}-\rho_B\alpha_B f_{o_{n+1}}^{\;-}-n\beta_B f_{o_n}^{\;-}\right]_B \tag{3.164}$$

Şekil 3.2'den gelen ve yansıyan dalgalar göz önüne alınarak yazılan dalga fonksiyonlarının sınır koşullarında yerine yazılması ile elde edilen ifadeler ise;

$$\mathrm{h_n}^{(1)}[\rho_A]+r\mathrm{h_n}^{(2)}[\rho_A]=t\mathrm{h_n}^{(1)}[\rho_B] \tag{3.165}$$

$$\left(\alpha_A\left(-\rho_A(h_{n+1}^{(1)}(\rho_A)+rh_{n+1}^{(2)}(\rho_A))+n(h_n^{(1)}(\rho_A)+rh_n^{(2)}(\rho_A))\right)-n\beta_A(h_n^{(1)}(\rho_A)+rh_n^{(2)}(\rho_A))\right)_A = \left(\alpha_B t\left(-\rho_B h_{n+1}^{(1)}(\rho_B)+nh_n^{(1)}(\rho_B)\right)-nt\beta_B h_n^{(1)}(\rho_B)\right)_B \tag{3.166}$$

Tek durumlar için n=(1/2-l_0) → n=0 durumu için geçiş katsayısını hesaplarsak. Denklem (3.165) ve (3.166) Mathematica yardımıyla birlikte çözülür ve tek durumlar için geçiş katsayısı;

$$T=\frac{4\rho_A\rho_B\alpha_A\alpha_B}{(\rho_A\alpha_A+\rho_B\alpha_B)^2+(\alpha_A-\alpha_B)^2} \tag{3.167}$$

4. ARAŞTIRMA BULGULARI

Bu bölümde tek ve çift durumlar için elde ettiğimiz geçiş katsayıları ifadelerinin potansiyelin sonsuz ($V \to \infty$) olması durumunda limit durumları incelenecektir, geçiş katsayılarının enerji ile değişimini gösteren bir grafik çizilecektir ve Landauer formülü aracılığıyla direnci hesaplanacaktır. Önce limit durumlarını incelenirse.

Tek durumlar için;

$$T = \frac{4\rho_A\rho_B\alpha_A\alpha_B}{(\rho_A\alpha_A + \rho_B\alpha_B)^2 + (\alpha_A - \alpha_B)^2} \tag{3.167}$$

Denklem (3.167)'den parantez içerisindeki $\rho_A\alpha_A$ ifadeleri parantez dışarısına çıkarılırsa,

$$T = \frac{4\rho_A\rho_B\alpha_A\alpha_B}{\rho_A{}^2\alpha_A{}^2\left[\left(1+\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}\right)^2 + \alpha_A{}^2\frac{1}{\rho_A{}^2\alpha_A{}^2}\left(1-\frac{\alpha_B}{\alpha_A}\right)^2\right]} \tag{4.1}$$

biçiminde yazılabilir. Burada $\chi = \frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}$ olarak tanımlayalım. Bu durumda denklem;

$$T = \frac{4\chi}{(1+\chi)^2 + \frac{1}{\rho_A{}^2}\left(1-\frac{\alpha_B}{\alpha_A}\right)^2} \tag{4.2}$$

$V \to \infty$ için geçiş katsayısının ifadesini hesaplayalım.

$$\lim_{V\to\infty} T = \lim_{V\to\infty} \frac{4\chi}{(1+\chi)^2 + \frac{1}{\rho_A{}^2}(1-\frac{\alpha_B}{\alpha_A})^2} \tag{4.3}$$

Denklem (4.3) χ ve α_B ifadelerinde potansiyel yer almaktadır. Bu yüzden önce α_B ve χ'nın limitlerini incelenecektir.

α_B'nin limiti;

$$\lim_{v\to\infty} \alpha_B = \lim_{v\to\infty}\left(\frac{2}{E+E_g-V} + \frac{1}{(E+E_g+\Delta-V)}\right) \Rightarrow 0 \tag{4.4}$$

χ'nın limiti ise;

$$\lim_{V\to\infty} \chi = \lim_{V\to\infty} \frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A} \tag{4.5}$$

$K^2 = \left(\frac{a^2}{4(E-E_g)(E+\Delta)} + \frac{2b^2}{E\left(E-E_g\right)} \right)^{-1} = \frac{4E(E-E_g)(E+\Delta)}{a^2E + 8b^2(E+\Delta)}$ denkleminde a=2b ve E=E+E_g yerine konulursa;

$\rho = Kr$

$$K_A = \sqrt{\frac{E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{b^2\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \qquad K_B = \sqrt{\frac{\left(E-V\right)\left(E+E_g-V\right)\left(E+E_g+\Delta-V\right)}{b^2\left(3E+3E_g+2\Delta-3V\right)}} \tag{4.6}$$

$$\rho_A = \sqrt{\frac{E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{b^2\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}}r \qquad \rho_B = \sqrt{\frac{\left(E-V\right)\left(E+E_g-V\right)\left(E+E_g+\Delta-V\right)}{b^2\left(3E+3E_g+2\Delta-3V\right)}}r \tag{4.7}$$

$$\alpha_A = \left(\frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{(E+E_g+\Delta)} \right) = \left(\frac{3E+3E_g+2\Delta}{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)} \right) \tag{3.139}$$

$$\lim_{V\to\infty} \chi = \lim_{V\to\infty} \frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}$$

$$= \lim_{V\to\infty} \frac{\sqrt{\frac{(E-V)(E+E_g-V)(E+E_g+\Delta-V)}{b^2(3E+3E_g+2\Delta-3V)} \frac{(3E+3E_g+2\Delta-3V)^2}{(E+E_g-V)^2(E+E_g+\Delta-V)^2}}r}{\sqrt{\frac{E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{b^2\left(3E+3E_g+2\Delta\right)} \frac{\left(3E+3E_g+2\Delta\right)^2}{(E+E_g)^2(E+E_g+\Delta)^2}}r} \tag{4.8}$$

$$\lim_{V\to\infty} \chi = \lim_{V\to\infty} \frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A} = \lim_{V\to\infty} \frac{\sqrt{\frac{(E-V)(3E+3E_g+2\Delta-3V)}{b^2(E+E_g-V)(E+E_g+\Delta-V)}}r}{\sqrt{\frac{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}{b^2(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}}r} \tag{4.9}$$

$$\lim_{V\to\infty} \chi = \lim_{V\to\infty} \frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}$$

$$= \lim_{V\to\infty} \sqrt{\frac{(E-V)(3E+3E_g+2\Delta-3V)}{b^2(E+E_g-V)(E+E_g+\Delta-V)} \frac{b^2(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \tag{4.10}$$

$$\lim_{V\to\infty} \chi = \lim_{V\to\infty} \frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}$$

$$= \lim_{V\to\infty} \sqrt{\frac{(E-V)(3E+3E_g+2\Delta-3V)}{(E+E_g-V)(E+E_g+\Delta-V)} \frac{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \tag{4.11}$$

$$\lim_{V\to\infty}\chi=\lim_{V\to\infty}\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}$$

$$=\lim_{V\to\infty}\sqrt{\frac{V(\frac{E}{V}-1)3V(\frac{3E}{3V}+\frac{3E_g}{3V}+\frac{2\Delta}{3V}-1)}{V(\frac{E}{V}+\frac{E_g}{V}-1)V(\frac{E}{V}+\frac{E_g}{V}+\frac{\Delta}{V}-1)}\frac{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \quad (4.12)$$

$$\lim_{V\to\infty}\chi=\lim_{V\to\infty}\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}=\sqrt{3\frac{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \quad (4.13)$$

Tek durumlar için potansiyelin sonsuz olması durumunda ($V\to\infty$) durumunda limit ifadesi;

$$V\to\infty\Rightarrow T=\frac{4\sqrt{3}\sqrt{\frac{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}}}{\left(1+\sqrt{3\frac{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{E\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}}\right)^2+\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{b^2\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}}r\right)^2}} \quad (4.14)$$

Tek hallerde $V\to\infty$ iken geçiş katsayısı T'nin sonlu bir değere sahip olacağı Denklem (4.14)'den görülebilir.

Çift durumlar için;

$$T=\frac{4\alpha_A\alpha_B\rho_A\rho_B}{\left(\left(\frac{\rho_A\alpha_A}{\rho_B}-\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A}-2\left(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B\right)\left(\frac{1}{\rho_A\rho_B}+1\right)\right)^2+\left(\rho_A\alpha_A+\rho_B\alpha_B-2\left(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B\right)\left(\frac{1}{\rho_A}-\frac{1}{\rho_B}\right)\right)^2\right)} \quad (3.144)$$

Denklem (3.144)'de $\rho_A\alpha_A$ ifadelerini parantez dışarısına çıkarılırsa,

$$T=\frac{4\alpha_A\alpha_B\rho_A\rho_B}{\rho_A^2\alpha_A^2\left(\left(\frac{1}{\rho_B}-\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A\rho_A}-\frac{2}{\rho_A\alpha_A}\left(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B\right)\left(\frac{1}{\rho_A\rho_B}+1\right)\right)^2+\left(1+\frac{\rho_B\alpha_B}{\rho_A\alpha_A}-\frac{2}{\rho_A\alpha_A}\left(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B\right)\left(\frac{1}{\rho_A}-\frac{1}{\rho_B}\right)\right)^2\right)} \quad (4.15)$$

Potansiyelin sonsuz olması durumunda ($V\to\infty$) için geçiş katsayısının ifadesi;

$$T=\frac{4\chi}{\left(\left(\frac{1}{\rho_B}-\frac{\chi}{\rho_A}-\frac{2}{\rho_A\alpha_A}\left(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B\right)\left(\frac{1}{\rho_A\rho_B}+1\right)\right)^2+\left(1+\chi-\frac{2}{\rho_A\alpha_A}\left(\alpha_A-\alpha_B+\beta_A-\beta_B\right)\left(\frac{1}{\rho_A}-\frac{1}{\rho_B}\right)\right)^2\right)} \quad (4.16)$$

$$\lim_{v\to\infty}\rho_B=\sqrt{\frac{(E-V)(E+E_g-V)(E+E_g+\Delta-V)}{b^2(3E+3E_g+2\Delta-3V)}r}$$

$$=\lim_{V\to\infty}\sqrt{\frac{V\left(\frac{E}{V}-1\right)V\left(\frac{E}{V}+\frac{E_g}{V}-1\right)\left(\frac{E}{V}+\frac{E_g}{V}+\frac{\Delta}{V}-1\right)}{b^2 3V\left(\frac{3E}{3V}+\frac{3E_g}{3V}+\frac{2\Delta}{3V}-1\right)}r}\Rightarrow\infty \tag{4.17}$$

$$\lim_{V\to\infty}\beta_B=\lim_{V\to\infty}\left(\frac{1}{E+E_g-V}-\frac{1}{(E+E_g+\Delta-V)}\right)\Rightarrow 0 \tag{4.18}$$

$$V\to\infty\Rightarrow T=\frac{4\chi}{\left(\left(-\frac{\chi}{\rho_A}-\frac{2}{\rho_A\alpha_A}(\alpha_A+\beta_A)\right)^2+\left(1+\chi-\frac{2}{\rho_A\alpha_A}(\alpha_A+\beta_A)\left(\frac{1}{\rho_A}\right)\right)^2\right)} \tag{4.19}$$

Denklem(4.19)'den çift durumlar için $V\to\infty$ iken geçiş katsayısı T'nin sonlu bir değere sahip olduğu görülür.

Landauer (1987)'ye göre direnç,

$$R_e=\frac{1}{e^2 v_F}\frac{2R}{T}\frac{\partial\varepsilon_F}{\partial n} \tag{4.20}$$

denklemi ile tanımlanmaktadır. Denklem (4.20)' de R ve T yansıma ve geçiş sayıları, sırasıyla ε_f Fermi enerjisi, n elektron yoğunluğu ve v_f fermi hızıdır.

Bu aşamada tek ve çift durumlar için direnç hesaplamalarını yapalım, Gashimzade, vd (2005) 'ye göre v_f ve k_f,

$$v_f=\frac{\partial\varepsilon_f}{\hbar\partial k_f} \qquad k_f=(3\pi^2 n)^{1/3} \tag{4.21}$$

$$\frac{1}{v_f}\frac{\partial\varepsilon_f}{\partial n}=\frac{\partial\varepsilon_f}{\partial n}\frac{\hbar\partial k_f}{\partial\varepsilon_f}=\frac{\hbar\partial k_f}{\partial n}=\frac{\hbar}{3}\left(\frac{3\pi^2}{n^2}\right)^{1/3} \tag{4.22}$$

şeklinde tanımlanmıştır. Tek durumlar için direnç,

$$R_e = \frac{1}{e^2 v_F}\frac{2R}{T}\frac{\partial \varepsilon_F}{\partial n} = \frac{\hbar}{2e^2 v_f}\left(\frac{1}{n^2}\right)^{1/3}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3}\frac{\left(\left(1+\rho_A{}^2\right)\alpha_A{}^2 - 2\left(1+\rho_A\rho_B\right)\alpha_A\alpha_B + \left(1+\rho_B{}^2\right)\alpha_B{}^2\right)}{\rho_A\rho_B\alpha_A\alpha_B} \quad (4.23)$$

Çift durumlar için,

$$R_e = \frac{1}{e^2 v_F}\frac{2R}{T}\frac{\partial \varepsilon_F}{\partial n}$$

$$\frac{1}{2e^2 v_f \rho_A{}^3 \rho_B{}^3 \alpha_A \alpha_B}\left(\begin{array}{l} \hbar\left(\frac{1}{n^2}\right)^{1/3}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3}\left(4+\rho_A{}^4\right)\left(1+\rho_B{}^2\right)\alpha_A{}^2 + 2\alpha_A\left(\begin{array}{l}\left(-2\left(2+\rho_B{}^2\right)-\rho_A{}^2\left(2+\rho_B{}^2+\rho_A\rho_B{}^3\right)\right)\alpha_B \\ +2\left(2+\rho_A{}^2\right)\left(1+\rho_B{}^2\right)\left(\beta_A-\beta_B\right)\end{array}\right) \\ +\left(1+\rho_A{}^2\right)\left(\left(4+\rho_A{}^4\right)\alpha_B{}^2 + 4\left(1+\rho_B{}^2\left(\beta_A-\beta_B\right)^2 + 4\left(2+\rho_B{}^2\right)\alpha_B\left(-\beta_A+\beta_B\right)\right)\right)\end{array}\right) \quad (4.24)$$

Denklem (4.7) aracılığıyla geçiş katsayısının enerjiye bağlı değişimini gösteren grafik çizilebilir. Yine Gashimzade, F M vd (2005)'de kare kuyu potansiyel ve basamak potansiyelinden geçiş sekiz bant kane modeli ile çalışılmıştır. Her iki potansiyel için elektronların yansıma katsayısı ve geçme olasılığının ifadeleri bulunduğu bu makalede,

$$K = \sqrt{\frac{3E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{P^2\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \quad (4.25)$$

olarak tanımlanmıştır. Denk. (4.25) ve bu çalışmada elde edilen K ifadesi arasında bir ilişki bulunabilir. Buna göre;

$$b = \frac{P}{\sqrt{3}} \quad (4.26)$$

şeklinde tanımlanır. E_p Kane parametresi ve P momentum operatörünün matris elemanı olmak üzere E_p ile P arasındaki ilişki,

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2}P^2 \quad (4.27)$$

Denklem (4.27) aracılığıyla verilir. Dolayısıyla Denk. (4.26) ve Denk. (4.27) gözönüne alınırsa ifadeler;

$$K_A = \sqrt{\frac{3E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{p^2\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \Rightarrow K_A = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{3E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{E_p\left(3E+3E_g+2\Delta\right)}} \tag{4.28}$$

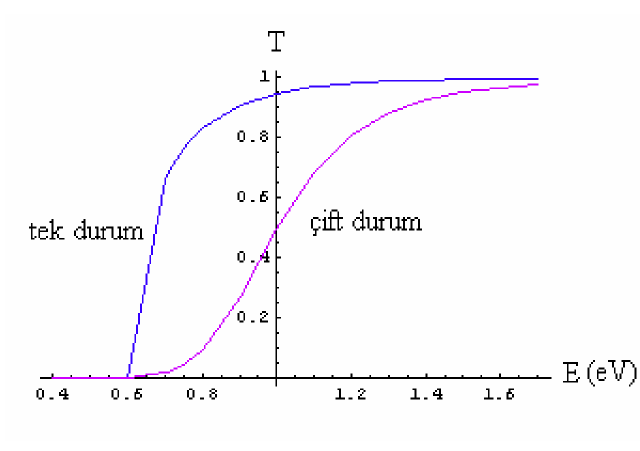
$$K_B = \sqrt{\frac{3(E-V)\left(E+E_g-V\right)\left(E+E_g+\Delta-V\right)}{p^2\left(3E+3E_g+2\Delta-3V\right)}} \Rightarrow K_B = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{3(E-V)\left(E+E_g-V\right)\left(E+E_g+\Delta-V\right)}{E_p\left(3E+3E_g+2\Delta-3V\right)}} \tag{4.29}$$

şekline dönüşür. Denk.(4.28) ve (4.29)'u boyutsuz hale getirmek için enerji boyutunda olan V ile çarpılıp bölünürse ve $\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}V}\,r = 2\pi$ yani sabit olarak tanımlanırsa,

$$\rho_A = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}V}\,r\sqrt{\frac{3E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{E_p\left(3E+3E_g+2\Delta\right)V}} = 2\pi\sqrt{\frac{3E\left(E+E_g\right)\left(E+E_g+\Delta\right)}{E_p\left(3E+3E_g+2\Delta\right)V}} \tag{4.30}$$

$$\rho_B = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}V}\,r\sqrt{\frac{3(E-V)\left(E+E_g-V\right)\left(E+E_g+\Delta-V\right)}{E_p\left(3E+3E_g+2\Delta-3V\right)V}} = 2\pi\sqrt{\frac{3(E-V)\left(E+E_g-V\right)\left(E+E_g+\Delta-V\right)}{E_p\left(3E+3E_g+2\Delta-3V\right)V}} \tag{4.31}$$

Bu aşamada InSb kuantum noktası için geçiş katsayılarının enerji ile değişimi Şekil 4.1 aracılığıyla gösterilir. Burada heteroyapı da kullanılan materyaller aynı olup tek fark potansiyelin olmasıdır. InSb için yasak enerji aralığı E_g=0.23 eV ve Kane parametresi E_p=23.42 eV ve V=0.6 eV alınmıştır.



Şekil 4.1 V=0.6 eV için tek ve çift durum için T geçiş katsayılarının enerji ile değişimi

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tezde, kane tipli yarıiletken kuantum noktalarında yük taşıyıcıların enerji spektrumunu hesaplamak için dönme grubuna göre değişmez kalan birinci mertebeden diferansiyel denklemler sistemi yardımıyla tek ve çift durumlarda elektronlar için küresel basamak potansiyel engelden geçiş katsayılarını hesapladık.

Şekil 4.1 yorumlanırsa, enerjinin değerinin potansiyel engelinin yüksekliğinden küçük olması durumunda geçiş katsayısının sıfır olduğu, enerjinin büyük olması durumunda ise bir sonlu değere sahip olacağı gözlenir. Klasik mekanikte parçacık $E>V_0$ enerjiyle ikinci bölgeye mutlaka geçiyordu. Fakat şimdi geri yansıma olasılığı da var. Enerjinin daha büyük değerleri için ise yansıma katsayısının değeri sıfıra yaklaşır.

Tek ve çift durumlar için Şekil 4.1 incelenirse, çift durumlar için geçiş katsayısının değerinin, tek durumlardan daha küçük olduğu gözlenir. Yani tek durumlar için yansıma daha azken, çift durumlar için yansıma fazladır.

Bir diğer durum ise; potansiyel engelin yüksekliği sonsuz olursa ($V \to \infty$), valans bant ve spin yörünge etkileşme sonucunda deşik bant dikkate alındığı zaman geçme katsayısı sonlu değer alır. Bu durum bir bantlı modelden farklıdır ve bu olay Dirac kuramında Kleyn Paradoksu olarak adlandırılır.

6.KAYNAKLAR

Abramovitz, M., Stegun I.A., 1972. Handbook of mathematical functions, 1037p

Askerov, B.M., 1994. Electronic transport phenomenain semiconductors. Sinqapore, World Scientific

Çıracı, S., 2004. Nanobilim ve Nanoteknoloji Stratejileri.Ankara Tübitak yayını, 26s.

Davies, J.H., 1998. The physics of low-dimensional semiconductors. an introduction, Newyork,451p.

Efros AI. L; Rosen M; 1998. Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of bant coupling. Physıcal Revıew B Volume 58, Number 11, 7120-7135, Washington

Gashimzade, F M; Babayev A M; Bagirov M A; 2000. Energy spectra of narrow- and zero-gap-semiconductor quantum dots. J.Phys 12(2000), 7923-7932,UK

Gashimzade, F M; Babayev A M; Çakmak S; Çakmaktepe S; 2005. Barrier penetration in Kane type semiconductor nanostructures. Physica E 28 (2005), 447-452

Gelfand, I M; Minlos, R A; Shapiro, Z.Y.; 1958. Representations of Groups of Rotations and the Lorentz Group, Moscow, Fizmatgiz

Harrison, P., 1999. Quantum Wells, Wires and Dots, Leeds, 434p.

Karaoğlu, B., 1998. Kuantum Mekaniğine Giriş, İstanbul, 243s.

Landauer, R.Z.; 1987. Electrical transport in open and closed systems, Phys.B:cond Matter 68 (1987), 217-228, Newyork

Lyubarskiy, G. Y.; 1957. Group Theory and its Application in Physics, Moscow: Fizmatgiz

Zakharova, A; Chao, K.A; 2002. Influence of bant state mixing on interbend magnetotunnelling in broken-gap heterostructures. J.Phys.: Condens. Matter 14 (2002), 5003–5016

Zakharova, A; Yen, S.T.; Chao, K.A.; 2004. Landau level structures and semimetal-semiconductor transition in strained InAs/GaSb quantum wells. Physıcal Revıew B 69, 115319 -1 115319-7

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Serdar TEZ

Doğum Yeri : Isparta

Doğum Yılı : 1983

Medeni Hali : Bekar

Eğitim ve Akademik Durumu:

Lise 1997 – 2000 Isparta Gazi Lisesi

Lisans 2000 – 2004 Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü

Yabancı Dil : İngilizce

İş Deneyimi:

2004 – 2005 Atılım Dershanesi