

**KUANTUM NOKTALARININ
ELEKTRİK VE MANYETİK ALAN ALTINDA
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ**

ÖZGE KILIÇOĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**Tez yöneticisi: Yrd.Doç.Dr.Saban AKTAS
Edirne-2008**

T.C

**TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**KUANTUM NOKTALARININ
ELEKTRİK VE MANYETİK ALAN ALTINDA
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ**

Özge KILIÇOĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİMDALİ**

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Saban AKTAS

EDİRNE – 2008

T.C

**TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**KUANTUM NOKTALARININ
ELEKTRİK VE MANYETİK ALAN ALTINDA
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ**

Özge KILIÇOĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİMDALİ**

Bu tez ... / ... / 2008 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Hasan AKBAS

Üye

Yrd. Doç. Dr. Cengiz DANE

Üye

Yrd. Doç. Dr. Saban AKTAS

Danisman

Yüksek Lisans Tezi

Kuantum Noktalarının Elektrik ve Manyetik Alan Altında Elektronik Özellikleri

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada, teknolojik uygulamalarda önemli bir yer tutan kuantum noktalarının elektronik özellikleri incelenmiştir. Hesaplamalar efektif kütle yaklaşımı içinde sonlu farklar yöntemi ve varyasyon yöntemi kullanılarak yapılmıştır. Temel olarak iç içe kübik GaAs/Al_xGa_{1-x}As kuantum noktaları çalışılmıştır. İç içe kübik kuantum noktaları içinde hapsedilen bir elektrona düzgün uygulanan elektrik ve manyetik alanın etkileri araştırılmıştır. Bu yapıda bağlanma enerjisi, bariyer genişliği, elektrik ve manyetik alanların fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Bağlanma enerjisinin değişimlerinin elektronun gördüğü potansiyel enerjiye, düzgün uygulanan elektrik ve manyetik alanın siddetine bağlı olduğu bulunmuştur. Ayrıca iç içe kübik kuantum noktaları için bağlanma enerjisindeki değişimler bariyer genişliğine bağlı olarak incelenmiştir.

Yıl:2008

Sayfa: 62

Anahtar Kelimeler: Kuantum Noktası, Elektrik Alan, Manyetik Alan, Bağlanma Enerjisi

M. S. Thesis

The Electronic Properties of Quantum Dots Under The Electric and Magnetic Field

Trakya University, Graduate School of Natural and Applied Science

Department of Physics

SUMMARY

In this work, the electronic properties of quantum dots, which have a great importance in technological applications, are investigated. The calculations are performed using the finite difference numerical method and variational method within the effective mass approximation. Basically, coaxial cubic GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum dots are studied. The effects of uniform applied electric and magnetic fields on binding energy of an electron confined in the coaxial cubic quantum dot are investigated. In this structure, the binding energy is calculated as functions of the barrier width, electric and magnetic field strengths. It is found that, the changes in the binding energy occurs depending on the magnitude of the confining potential, and the applied uniform electric and magnetic field strengths. Also, the changes in the binding energy are investigated depending on the barrier width for the coaxial cubic quantum dot.

Year: 2008

Pages: 62

Keywords: Quantum Dot, Electric Field, Magnetic Field, Binding Energy

TESEKKÜRLER

Tez yöneticiligimi üstlenerek çalısmalarimda yol gösteren, gerekli olan tüm çalıisma ortamini ve imkanlarini saglayan ve yardımlarini esirgemeyen hocam Yrd. Doç. Dr. Saban AKTAS' a tesekkür etmekten mutluluk duyarim.

Ayni zamanda bu asamaya kadar desteklerini ve aydinlatici bilgilerini esirgemeyen hocalarim Yrd. Doç. Dr. Figen Karaca Boz'a, Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Baskani Prof. Dr. Hasan AKBAS' a tesekkürlerimi sunarim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
SUMMARY	ii
TESEKKÜRLER	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SIMGELER DİZİNİ	v
SEKİL LİSTESİ	vi
BÖLÜM 1 : GIRIS	1
BÖLÜM 2 : DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR	3
2.1.a) Kuantum Kuyulari	4
2.1.b) Kuantum Telleri	18
2.1.c) Kuantum Noktaları	20
2.2) Kuantum Noktasına Düzgün Elektrik Alanın Etkisi	22
2.3) Kuantum Noktasına Düzgün Manyetik Alanın Etkisi	23
2.4) Kuantum Noktasındaki Yabancı Atom Problemi	26
2.5) Varyasyon Yöntemi	28
BÖLÜM 3 : DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARIN ÇÖZÜMÜ İÇİN SAYISAL YÖNTEM . 31	
3.1) Sonlu Farklar Yöntemi	31
3.2) Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Kuyularına Uygulanışı	32
3.3) Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Noktalarına Uygulanışı	34
3.3.a) Elektrik alan etkisi	35
3.3.b) Manyetik alan etkisi	35
3.3.c) Yabancı atom etkisi	36
BÖLÜM 4 : İÇ İÇE KUANTUM NOKTALARI	41
4.1) İç içe kübik kuantum noktasında elektrik ve manyetik alan etkisi	41
4.2) İç içe kübik kuantum noktasında yabancı atom etkisi	43
SONUÇLAR VE TARTİSMALAR	60
KAYNAKLAR	61

SIMGELER DIZINI

m^*	:	Ektronun etkin kütle
a^*	:	Etkin Bohr yarıçapı
R^*	:	Etkin Rydberg enerjisi
ϵ	:	Dielektrik sabiti
I	:	Varyasyonel parametre
g	:	Manyetik alanin boyutsuz degeri
Ψ	:	Dalga fonksiyonu
x_i, y_i, z_i	:	Yabancı atomun konumu
h	:	Hamiltonyendeki elektrik alan terimi
F	:	Elektrik alan siddeti
B	:	Manyetik alan siddeti
E	:	Enerji
V_0	:	Potansiyel enerji yüksekliği
R_1, R_2, R_3	:	İç içe kuantum noktasındaki bariyer konumlari
R_B	:	Bariyer genişliği $(R_2 - R_1)$
f, q	:	Elektrik alan bileşen açıları

SEKIL LISTESİ

Sekil (2.1.a.1) : $2L$ genişliğinde sonsuz potansiyel kuyusu.	4
Sekil (2.1.a.2) : Bir boyutlu sonsuz potansiyel kuyusu için ilk üç enerji düzeyi ve karşı gelen dalga fonksiyonları.	8
Sekil (2.1.a.3) : $2L$ genişliğinde ve V_0 derinliğinde sonlu potansiyel kuyusu.	9
Sekil (2.1) : Kuantum kuyusunun enerji bant yapısının sematik gösterimi.	3
Sekil (2.2) : Elektrik ve manyetik alan etkisinde kare kuyu içerisindeki bir elektronun taban durum enerjisi ve bağlanma enerjileri ile birlikte elektronun normalize edilmiş bir boyutta dalga fonksiyonları.	15
Sekil (2.3) : Elektrik ve manyetik alan etkisinde üçgen kuyu içerisindeki bir elektronun taban durum enerjisi ve bağlanma enerjileri ile birlikte elektronun normalize edilmiş bir boyutta dalga fonksiyonları.	16
Sekil (2.4) : Elektrik ve manyetik alan etkisinde parabol kuyu içerisindeki bir elektronun taban durum enerjisi ve bağlanma enerjileri ile birlikte elektronun normalize edilmiş bir boyutta dalga fonksiyonları.	17
Sekil (2.1.b.1) : Kare kesitli kuantum telinin sematik gösterimi.	18
Sekil (2.1.c.1) : Kübik kuantum noktasının sematik gösterimi.	20
Sekil (2.4.1) : İki boyutta 4 elektronlu bir sisteme 5 elektronlu bir yabancı atom eklendiği durum.	26
Sekil (3.1.1) : Sonlu farklar yöntemi ile fonksiyonun gösterimi.	31
Sekil (3.2.1) : Sonlu kuantum kuyusuna sonlu farklar yönteminin uygulanışı.	32
Sekil (3.1) : Kübik kuantum noktasında, a) $F=0kV/cm$, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$ ve $L=1a^*$, b) $F=0kV/cm$, $B=5Tesla$, $V_0=41R^*$ ve $L=1a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.	37
Sekil (3.2) : Kübik kuantum noktasında, a) $F=50kV/cm$, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$ ve $L=1a^*$, b) $F=50kV/cm$, $B=5Tesla$, $V_0=41R^*$ ve $L=1a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.	38
Sekil (3.3) : Kübik kuantum noktasında $F=0;20kV/cm$, $B=0;5Tesla$ ve $V_0=41R^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun enerjisinin kübik noktanın genişliğine göre değişimi.	39

- Sekil (3.4)** : Kübik kuantum noktasında $F=0 ;20 ;40 ;60kV/cm$, $L=1a^*$ ve $V_0=41R^*$ degerleri için taban durumundaki elektronun enerjisinin manyetik alana göre degisimi. 40
- Sekil (4.1.1)** : Dis yüzeyi GaAlAs maddesi ile kapli iç içe kübik kuantum noktası. 41
- Sekil (4.1.2)** : İç içe kuantum noktasinin malzemelerin yapısından olusan x yönündeki potansiyel enerji.42
- Sekil (4.1)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=0kV/cm$, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.44
- Sekil (4.2)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=40kV/cm$, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.45
- Sekil (4.3)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=40kV/cm$, $B=5Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu. 46
- Sekil (4.4)** : İç içe kübik kuantum noktasında, a) $F=0 ;20kV/cm$, $B=0 ;5Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_2=1.5a^*$, $R_3=2.0a^*$, b) $F=0 ;40kV/cm$, $B=0 ;5Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_2=1.5a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerlerinde R_1 ' e göre elektronun taban durumu enerji degisimleri. 47
- Sekil (4.5)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=0 ;20 ;40kV/cm$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.5a^*$, $R_2=1.1a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerleri için elektronun taban durumu enerjisinin manyetik alana göre degisimi. 48
- Sekil (4.6)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $B=5 ;10Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerleri için elektronun taban durumu enerjisinin elektrik alana göre degisimi. 49
- Sekil (4.7)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.5a^*$, $R_2=1.1a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerlerinde ve $\mathbf{q}=\mathbf{p}/2$, $\mathbf{f}=0$ yönünde büyüklüğü $F=30kV/cm$ ' lik elektrik alanin etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu. 50
- Sekil (4.8)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.5a^*$, $R_2=1.1a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerlerinde ve $\mathbf{q}=\mathbf{p}/3$, $\mathbf{f}=\mathbf{p}/3$ yönünde büyüklüğü $F=30kV/cm$ ' lik elektrik alanin etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu. 51

- Sekil (4.9)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $B=0\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.5a^*$, $R_2=1.1a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerlerinde ve $\mathbf{q}=\mathbf{p}/4$, $\mathbf{f}=\mathbf{p}/4$ yönünde büyüklüğü $F=30\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alanin etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu. 52
- Sekil (4.10)** : İç içe kübik kuantum noktasında, $B=0\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.5a^*$, $R_2=1.1a^*$, $R_3=2.0a^*$ degerlerinde ve $\mathbf{q}=\mathbf{p}/6$, $\mathbf{f}=\mathbf{p}/6$ yönünde büyüklüğü $F=30\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alanin etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu. 53
- Sekil (4.11)** : Kübik kuantum noktasinin merkezdeki yabancı atom için, $L=1a^*$ ve $V_0=41R^*$ degerlerinde, $F=0;20;40;60\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alan etkisindeki elektronun baglanma enerjisinin manyetik alana siddetine göre degisimi. 54
- Sekil (4.12)** : Kübik kuantum noktasinin merkezdeki yabancı atom için, $L=1a^*$ ve $V_0=41R^*$ degerlerinde, $B=0;2.5;5\text{Tesla}$ ' lik manyetik alan etkisindeki elektronun baglanma enerjisinin elektrik alan siddetine göre degisimi. 55
- Sekil (4.13)** : Kübik kuantum noktasinin merkezdeki yabancı atom için, $V_0=41R^*$ ve $B=5\text{Tesla}$ degerlerinde, $F=50;60;70;80\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alan siddeti etkisindeki elektronun baglanma enerjisinin nokta genisligine göre degisimi. 56
- Sekil (4.14)** : İç içe kübik kuantum noktasinin içindeki bir elektronun, $V_0=41R^*$, $B=0-5\text{Tesla}$ ve $F=0;40\text{kV/cm}$ ' lik manyetik ve elektrik alan degerlerinde taban durumundaki enerjisinin bariyer genisligine göre degisimi. 57
- Sekil (4.15)** : İç içe kübik kuantum noktasinin merkezdeki yabancı atom için, $V_0=41R^*$ ve $B=0\text{Tesla}$ degerlerinde, $F=0;20;40;60\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alan siddeti etkisindeki elektronun baglanma enerjisinin nokta genisligine göre degisimi. 58
- Sekil (4.16)** : İç içe kübik kuantum noktasinin merkezdeki yabancı atom için, $V_0=41R^*$ ve $B=0\text{Tesla}$ degerlerinde, $F=0;20;40;60\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alan siddeti etkisindeki elektronun baglanma enerjisinin nokta genisligine göre degisimi. 59
- Sekil (4.17)** : İç içe kübik kuantum noktasinin merkezdeki yabancı atom için, $V_0=41R^*$ ve $B=0\text{Tesla}$ degerlerinde, $F=0;20;40;60\text{kV/cm}$ ' lik elektrik alan siddeti etkisindeki elektronun baglanma enerjisinin bariyer genisligine göre degisimi. 60

BÖLÜM 1:GİRİŞ

Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin fiziksel özelliklerinin anlaşılabilmesi için son yıllarda bazı yeni fiziksel kavramlar üstünde araştırmalar ve varsayımlar yapılmaktadır. Farklı enerji bant yapılarına sahip yarıiletkenlerin bir araya gelmesiyle düşük boyutlu yapılar oluşmaktadır. Kristal büyütme teknolojisinde sağlanan gelişmeler ile yarıiletkenler çok hassas biçimde bir atomik tabaka üzerine başka bir tabaka yerleştirilerek büyütülebilmektedir. Bu deneysel yöntemler ile boyutlar 1 nm' den daha küçük düşük boyutlu yapıların üretimi gerçekleştirilmiştir. Bu gelişmelerin sonucu yeni elektronik devre elemanlarının yapımı son derece ilgi çekici fizik problemlerini de doğurmuştur ve bununla birlikte teknolojik açıdan gelişmelere yol açmıştır.

Kuantum fiziği, yarıiletken yapıların davranışlarını açıklayabilir olması günümüzde düşük boyutlu yarıiletken elektronik devre elemanlarının üretimini hızlandırmıştır. İki boyutlu sistemler kuantum kuyu lazerleri ve yeni diyot ve transistörlerin yapımına öncülük etmiştir. Bir ve sıfır boyutlu yarıiletken sistemlerin fiziksel özelliklerinden yararlanarak yeni uygulamaların yapılması da gündemdedir. Kuantum nokta lazerlerinin henüz ortaya çıkmasına rağmen, kısa zamanda yeni elemanların üretimi için kilit rol oynayacağı umulmaktadır. Kuantum noktalar için önemli bir potansiyel uygulama da kuantum bilgisayarlarıdır. Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerden oluşan nanometre boyutunda elektronik ve optoelektronik cihazlar günümüz bilgisayar ve haberleşme endüstrisinde kullanılan devrelerin temel yapıtaşlarını oluşturmaktadır. Düşük boyutlu yapıların daha ayrıntılı olarak incelenmesi ile bu cihazların, fiziğinin ve çalışma prensiplerinin belirlenmesi mümkündür.

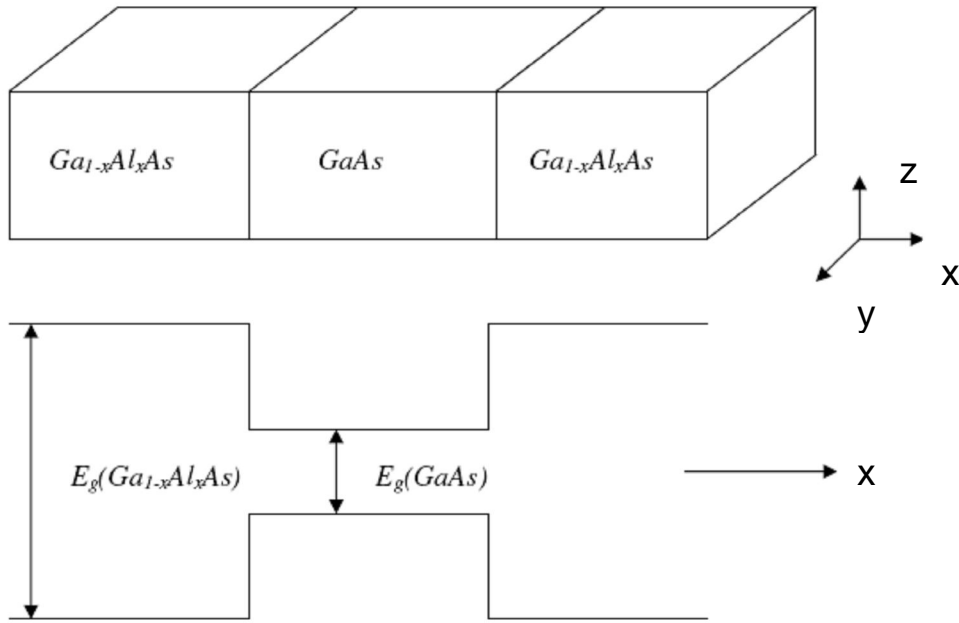
Kuantum kuyular, kuantum telleri ve kuantum noktalar düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin geometrik sınıflandırılmasını oluştururlar. Bu sınıflandırılma yapılırken taşıyıcı yükün hareketinin kaç boyutta sınırlı ve kaç boyutta serbest tutulduğu göz önüne alınır. Kuantum kuyularında taşıyıcı hareketi bir boyutta, kuantum tellerinde iki boyutta ve kuantum noktalarında ise her üç boyutta sınırlandırılmıştır. Taşıyıcı yükün serbest olarak hareket edebileceği boyut sayısı göz önüne alınarak, kuantum kuyular iki boyutlu, kuantum telleri bir boyutlu ve kuantum noktaları sıfır boyutlu yarıiletken sistemler olarak adlandırılır. Bu sistemlerde taşıyıcı yük elektron, boşluk veya eksiton olabilir.

Yarı iletken malzemenin iletkenliđi yabancı atom katılması ile arttırılabilir. Bu yüzden bir yabancı atomun yapıya eklediđi ilave elektron enerji öz durumları ve bağlanma enerjileri yapıyı karakterize eder. Kuantum kuyular ve tellerinde geometrik etkiler yabancı atomun enerji öz durumlarını ve bağlanma enerjilerini deđiştirir. Farklı geometrideki kuantum kuyular ve telleri bu enerji öz durumları ve bağlanma enerjileri de farklıdır. Kuantum kuyu, tel ve noktalarında elektrik alan ve manyetik alan uygulanması ile meydana gelen fiziksel özelliklerden yararlanarak daha iyi devre elemanları geliştirilebilir.

Bu gibi deđişik yapıların elektrik, manyetik alanların ve yapı içerisinde bulunan bir yabancı atomun, elektronun enerji öz durum ve öz fonksiyonuna etkisini irdelemek bu çalışmanın içeriđini oluşturmaktadır.

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR

Düşük boyutlu yapılar, kuantum kuyular, kuantum telleri ve kuantum noktalar olarak sınıflandırılırlar. Burada boyut yük taşıyıcının(elektron) serbest olarak hareket edebileceği yön sayısını belirtir. Kuantum kuyuları aynı türden iki yarıiletken tabakanın arasına farklı tür yarıiletken tabakanın eklenmesiyle oluşturulur. Kuantum kuyularına örnek olarak $Ga_{1-x}Al_x/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ yapı verilebilir. Burada x alüminyum konsantrasyonudur. Kuantum kuyularında yük taşıyıcıları iki boyutta serbest parçacık gibi hareket edebilirken, farklı tabakaya doğru (kristalin büyüme yönünde) hareketleri bir boyutta sınırlanır ve enerjileri kuantize olur. Taşıyıcıların hareketinin iki boyutta kuantize olduğu yapılar kuantum telleri olarak adlandırılır. Kuantum tellerine örnek olarak $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş kare, üçgen veya silindirik kesitli bir GaAs teli verilebilir. Kuantum noktalarında ise taşıyıcının hareketi üç boyutta da kuantize olur. $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş küp veya küresel biçimli GaAs kuantum noktaları oluşturulabilir.



Şekil (2.1) : Kuantum kuyusunun enerji bant yapısının şematik gösterimi.

Şekil (2.1)'de gösterildiği gibi kuantum kuyusu $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletkenleri arasında GaAs yarıiletkeninin yerleştirilmesiyle oluşturulur. Burada x malzemedeki alüminyum miktarını göstermektedir.

2.1.a) Kuantum Kuyul >

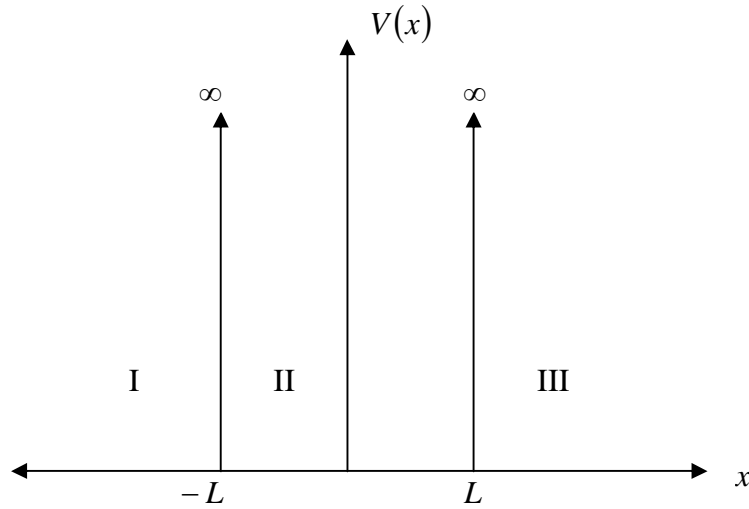
Düşük boyutlu yapılarda hapsedilen bir elektronun özelliklerini incelerken zamandan bağımsız Schrödinger denklemini çözerek elektronun enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonla > elde edilir. Parçacığın hapsedildiği potansiyel duvarın yüksekliğine göre sonlu kuantum kuyusu ve sonsuz kuantum kuyusu oluşmaktadır. İlk olarak sonsuz kuantum kuyusu incelenecektir.

* Sonsuz Potansiyel Kuyusu

Burada, Şekil (2.1.a.1)'de görüldüğü gibi ve potansiyel fonksiyonu

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , |x| \leq L \\ +\infty & , |x| > L \end{cases} \quad (2.1.a.1)$$

şeklinde tanımlanan bir boyutlu, sonsuz potansiyel kuyusu içinde m kütleli bir parçacığın hareketini kuantum mekaniksel olarak incelenmiştir..



Şekil (2.1.a.1) : 2L genişliğinde sonsuz potansiyel kuyusu.

Enerjisi E olan bir parçacık için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.1.a.2)$$

olur. I. ve III. Bölgelerde potansiyel $V(x)=\infty$ ve buralarda parçacık olmadığından dalga fonksiyonu sıfırdır. Bu durumda;

$$\Psi_I(x) = \Psi_{III}(x) = 0 \quad (2.1.a.3)$$

olur. II. Bölgede ise $V(x)=0$ 'dir. Schrödinger denkleminde yerine yazılırsa,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = E\Psi(x) \quad (2.1.a.4)$$

elde edilir. Bu denklemin çözümleri belirlenirse,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) = 0 \quad (2.1.a.5)$$

olur. Bu denklemin çözümü, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ olmak üzere $\Psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$, dir.

Exponansiyelli ifadelerin açılmasıyla,

$$\Psi(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (2.1.a.6)$$

dalga fonksiyonunu elde edilir. Buradaki katsayılar $A = (C_1 + C_2)$ ve $B = i(C_1 - C_2)$ 'dir. Sınır koşullarından;

$$\Psi(-L) = \Psi(L) = 0 \quad (2.1.a.7)$$

olmalı. Bu şartlar uygulanacak olursa,

$$\Psi(-L) \text{ için } A \cos k(-L) + B \sin k(-L) = 0$$

$$A \cos kL - B \sin kL = 0 \quad (2.1.a.8)$$

$$\Psi(L) \text{ için } A \cos kL + B \sin kL = 0 \quad (2.1.a.9)$$

denklemleri elde edilir. Buradan katsayılar determinan sıfıra eşit olmalıdır.

$$\begin{vmatrix} \cos kL & \sin kL \\ \cos kL & -\sin kL \end{vmatrix} = 0$$

$$\cos kL(-\sin kL) - \cos kL \sin kL = 0$$

$$2 \cos kL \sin kL = 0$$

$$2k_n L = n\pi \quad (n = \mp 1, \mp 2, \mp 3, \dots) \quad (2.1.a.10)$$

$$k_n = \frac{n\pi}{2L} \quad (2.1.a.11)$$

Bu bağıntıyı kullanarak denklem (2.1.a.5)'de tanımlanan E_n enerjisi k_n 'ye bağlı olduğundan n 'ye bağlı kuantize olmuş enerji değerleri,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} n^2 \quad (2.1.a.12)$$

olur. Bu sonuca göre sonsuz kuyu içindeki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir n tamsayısına bağlı olarak kesikli değerler yani kuantize edilmiş düzeylerinde bulunabilir. k_n 'yi denklem (2.1.a.6)'deki dalga fonksiyonunda yerine yazarsa,

$$\Psi_n(x) = A \cos\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) + B \sin\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) \quad (2.1.a.13)$$

denklemini elde edilir. Denkleminde de görüldüğü gibi n 'nin tek ve çift değerleri için iki tür özfonksiyonun varlığı söz konusudur.

$$n \text{ tek ise } A \neq 0, B = 0$$

$$n \text{ çift ise } A = 0, B \neq 0$$

olmalıdır. Bu durumda,

$$\Psi_n^+(x) = A \cos\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) \quad n: \text{tek} \quad (2.1.a.14)$$

$$\Psi_n^-(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) \quad n: \text{\u00e7ift} \quad (2.1.a.15)$$

A ve B katsayıların hesaplamak için dalga fonksiyonların bulduklar uzay içinde normalize edilmelidir. Yani ;

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\Psi(x))^* (\Psi(x)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.1.a.16)$$

Normalizasyon koşulundan elde edilir.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n^+(x)|^2 dx &= 1 \\ |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \cos^2\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) dx &= 1 \\ A &= \frac{1}{\sqrt{L}} \\ \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n^-(x)|^2 dx &= 1 \\ |B|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) dx &= 1 \\ B &= \frac{1}{\sqrt{L}} \end{aligned}$$

Artık A ve B katsayılarını bildiğine göre sonsuz potansiyel kuyusu için \u00e7\u00f6z\u00fcm\u00fclerini yazabilir.

$$\begin{aligned} \Psi_n^+(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) \quad n: \text{tek} \\ \Psi_n^-(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) \quad n: \text{\u00e7ift} \\ E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} n^2 \end{aligned} \quad (2.1.a.17)$$

$$\Psi_n^+(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{2L} x\right), \quad \Psi_n^-(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2L} x\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} n^2$$

$$\rightarrow E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2}$$

$$\Psi_1^+(-L) = \Psi_1^+(L) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{\pi}{2L} L\right) = 0$$

$$\Psi_1^+\left(\frac{-L}{2}\right) = \Psi_1^+\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{\pi}{2L} \frac{L}{2}\right) = 0,7\sqrt{\frac{1}{L}}$$

$$\Psi_1^+(0) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos(0) = \sqrt{\frac{1}{L}}$$

$$\rightarrow E_2 = 4E_1$$

$$\Psi_2^-(-L) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{2L} (-L)\right) = 0, \quad \Psi_2^-(L) = 0$$

$$\Psi_2^-\left(\frac{-L}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{2L} \left(\frac{-L}{2}\right)\right) = -\sqrt{\frac{1}{L}}$$

$$\Psi_2^-\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{2L} \frac{L}{2}\right) = \sqrt{\frac{1}{L}}$$

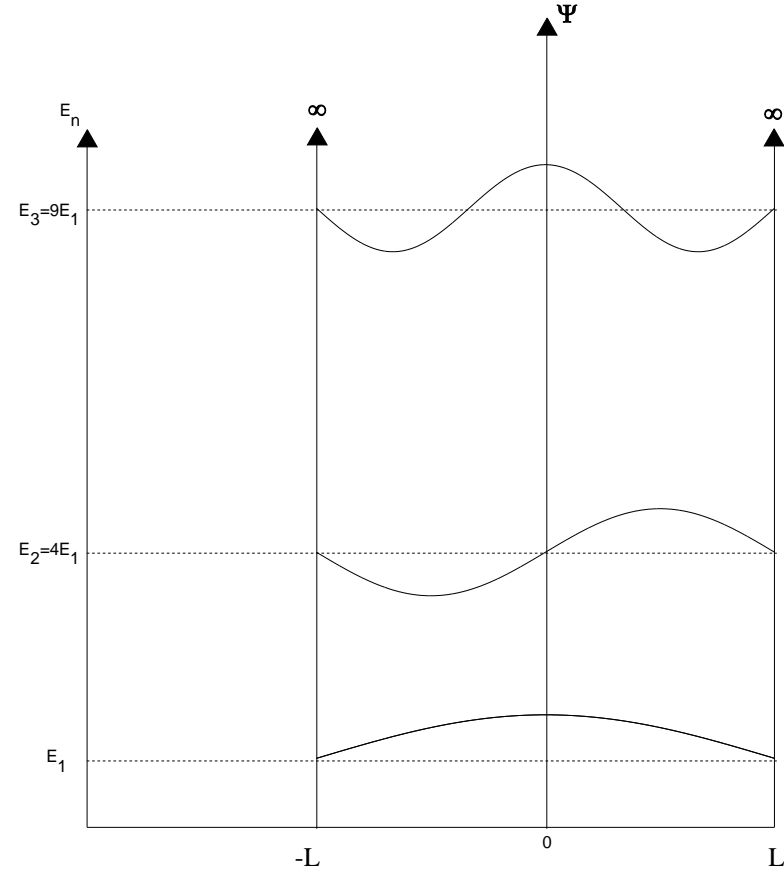
$$\Psi_2^-(0) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin(0) = 0$$

$$\rightarrow E_3 = 9E_1$$

$$\Psi_3^+(-L) = \Psi_3^+(L) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{3\pi}{2L} L\right) = 0$$

$$\Psi_3^+\left(\frac{-L}{2}\right) = \Psi_3^+\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{3\pi}{2L} \frac{L}{2}\right) = -0,7\sqrt{\frac{1}{L}}$$

$$\Psi_3^+(0) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos(0) = \sqrt{\frac{1}{L}}$$

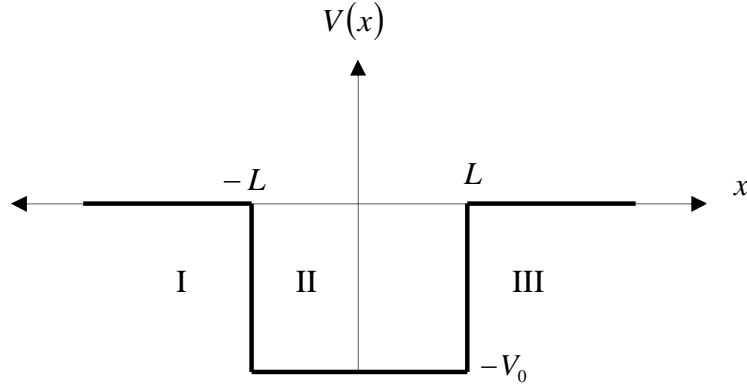


Şekil (2.1.a.2): Bir boyutlu sonsuz potansiyel kuyusu için ilk üç enerji düzeyi ve karşı gelen dalga fonksiyonla .

* Sonlu Potansiyel Kuyusu

Şekil(2.1.a.3)'de potansiyel fonksiyonu ile tanımlanan sonlu potansiyel kuyusu şeklinde potansiyel enerjiye sahip m^* kütleli bir parçacığın E toplam enerjisinin $E > 0$ ve $-V_0 < E < 0$ değerleri için bağlı durum problemidir. Burada bu durum incelenmiştir.

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & , |x| \leq L \\ +\infty & , |x| > L \end{cases} \quad (2.1.a.18)$$



Şekil (2.1.a.3): $2L$ genişliğinde ve V_0 derinliğinde sonlu potansiyel kuyusu.

Sonlu kuyu için Schrödinger denklemi,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi(x) = 0 \quad (2.1.a.19)$$

şeklinde yazılır.

I ve III. Bölgeler:

Bu bölgelerde $V(x) = 0$ 'dir. Bu durumda Schrödinger denklemi,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi(x) = 0 \quad (2.1.a.20)$$

şeklinde yazılır ve dalga fonksiyonları $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ olmak üzere,

$$\Psi_I(x) = e^{ikx} + R.e^{-ikx} \quad , \quad \Psi_{III}(x) = T.e^{ikx} \quad (2.1.a.21)$$

dir. Burada R yansıyan dalganın genliği ve T geçen dalganın genliğidir. I. Bölgede soldan sağa gelen dalganın genliğini 1 kabul edilip ve III. bölgede ancak sonsuzdan bir yansıma olacağından e^{-ikx} terimi ihmal edilir..

II. Bölge:

Bu bölgede ise $V(x) = -V_0$ 'dır. Bu durumda Schrödinger denklemini yazarsa,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \Psi(x) = 0 \quad (2.1.a.22)$$

olur ve $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$ olmak üzere,

$$\Psi_{II}(x) = A e^{iqx} + B e^{-iqx} \quad (2.1.a.23)$$

II. bölgedeki dalga fonksiyonu belirlenir. Burada A I. bölgeden II. bölgeye geçen dalganın genliği ve B III. bölgeden II. bölgeye yansıyan dalganın genliğidir. Potansiyel enerji fonksiyonunun $x = -L$ ve $x = L$ 'de süreksizlikleri sonlu olduğundan $\Psi(x)$ çözümleri ve türevleri bu noktalarda aşağıdaki süreklilik koşullarını sağlamalıdır.

$$\begin{aligned} \Psi_I(-L) &= \Psi_{II}(-L) & , & & \Psi_I'(-L) &= \Psi_{II}'(-L) \\ \Psi_{II}(L) &= \Psi_{III}(L) & , & & \Psi_{II}'(L) &= \Psi_{III}'(L) \end{aligned} \quad (2.1.a.24)$$

Bu süreklilik koşulları sağlayan A, B, T ve R değerleri hesaplandığında; (Burada $\Psi' = \frac{d\Psi}{dx}$ 'dır.)

$$\begin{aligned}
A &= \left(\frac{q+k}{2q} \right) T e^{i(k-q)L} \\
B &= \left(\frac{q-k}{2q} \right) T e^{i(k+q)L} \\
T &= \frac{2kq e^{-2ikL}}{2kq \cos(2qL) - i(q^2 + k^2) \sin(2qL)} \\
R &= \frac{i(q^2 - k^2) \sin(2qL) e^{-2ikL}}{2kq \cos(2qL) - i(q^2 + k^2) \sin(2qL)}
\end{aligned} \tag{2.1.a.25}$$

olur. Bu çözümlerden açıkça görüldüğü gibi, potansiyel enerjinin değiştiği her yerde (bu problem için $x = \mp L$ noktalarında), Schrödinger denkleminin çözümü olan $\Psi(x)$ olasılıklı dalgaların kısmen yansımakta, kısmen geçmektedir. Bu klasik dalgaların içinde ilerledikleri ortamın değiştiği her yerde kısmen geçmesi olayına benzer. Potansiyel enerji fonksiyonu buradaki gibi değişen bir klasik noktasal parçacığın hareketi ise oldukça farklıdır. Soldan sağa doğru düzgün doğrusal hareket ile ilerleyen böyle bir parçacık $-L < x < L$ bölgesinde (potansiyel enerji azaldığı için) daha yüksek bir hızda ve $x > L$ bölgesinde ve yine $x < -L$ bölgesindeki hız değeri ile düzgün doğrusal hareket yaparak ilerler.

(2.1.a.25)'deki T ve R çözümlerinin dikkatle incelenmesi ile çıkarılabilecek iki önemli özellik şunlardır:

(i) Eğer $E \gg V_0$ ise, bu durumda $q \approx k$ olduğundan $R=0$ olur. Böyle bir sistem tipik klasik bir dalga veya parçacık gibi küçük derinlikli kuyudan fazla etkilenmeden yansımaz olarak geçip gidecektir.

(ii) $R=0$ yapan diğer bir durum ise $\sin 2qL=0$ koşuludur.

$$\begin{aligned}
\sin 2qL &= 0 \\
2q_n L &= n\pi
\end{aligned} \tag{2.1.a.26}$$

$$q_n = \frac{\pi}{2L} n \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \rightarrow \text{(denklem (2.1.a.23)'den)}$$

$$E_n = -V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2} n^2 \tag{2.1.a.24}$$

Bu enerjiye sahip bir parçacık için hiç bir yansıma yoktur. Geçiş rezonansı denilen bu yansımaz olaya *Ramsauer-Townsend* olayı olarak bilinir. Dalga dilinde bu olay $x = L$ 'den

yansayan dalga ile $x = -L$ kısmından bir,iki,üç,... kez yansayan dalgalar arasındaki yansıma girişime bağlıdır. $2qL = n\pi$ rezonans koşulu,

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} = \frac{4L}{n} \quad (2.1.a.28)$$

biçiminde yazılır. Bu aslında düşük enerjili elektronların (yaklaşık 0,1eV) neon ve argon gibi asal gaz atomlarından saçılmasında neler olduğunu açıklayan bir modeldir.

$-V_0 < E < 0$ Bağlı Durumu

Şekil(2.1.a.2)'den üç bölgede Schrödinger denklemini yazılırsa,

I. ve III. Bölge

$V(x)=0$ ve $E < 0$ olduğundan Schrödinger denklemini,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} |E| \Psi(x) = 0 \quad (2.1.a.29)$$

olur. $K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$ olmak üzere I. ve III. bölgelerdeki dalga fonksiyonları,

$$\Psi_I(x) = C_1 e^{Kx} \quad , \quad \Psi_{III}(x) = C_2 e^{-Kx} \quad (2.1.a.30)$$

olur. (E negatif olduğundan $|E| = -E$ olacaktır.)

II. Bölge

$V(x) = -V_0$ ve $E < 0$ olduğundan Schrödinger denklemini,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (-|E| + V_0) \Psi(x) = 0 \quad (2.1.a.31)$$

olur. $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)$ olmak üzere II. bölgedeki dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{II}(x) = A \cos qx + B \sin qx \quad (2.1.a.32)$$

olur. Bu çözümler fizikçe kabul edilebilir yak nsak çözümlerdir. Denklem (2.1.a.24)'de yapıldığı gibi sınır koşulları bu problem içinde tekrarlan rsa,

$$\text{i) } C_1 e^{-KL} = A \cos qL - B \sin qL$$

$$\text{ii) } KC_1 e^{-KL} = q(A \cos qL + B \sin qL)$$

$$\text{iii) } A \cos qL + B \sin qL = C_2 e^{-KL}$$

$$\text{iv) } q(A \cos qL - B \sin qL) = KC_2 e^{-KL}$$

eşitlikleri elde edilir. İlk iki ve son iki eşitliği kendi arasında oranlanırsa,

$$K = q \left(\frac{A \sin qL + B \cos qL}{A \cos qL - B \sin qL} \right) = q \left(\frac{A \sin qL - B \cos qL}{A \cos qL + B \sin qL} \right) \quad (2.1.a.33)$$

belirlenir. Bu denklemin eşitlenebilmesi için $A.B = 0$ olmalı. Yani $A = 0$ ise $B \neq 0$ veya $A \neq 0$ ise $B = 0$ olmalı.

Cift çözümler ($A \neq 0$ ise $B = 0$)

Bu durumda i ile iii' den hesaplandığında $C_1 = C_2$ olur. Denklem (2.1.a.32-33)' den, $K = q \tan qL$ olmak üzere II. bölgedeki çift dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{II}^+(x) = A \cos qx \quad (2.1.a.34)$$

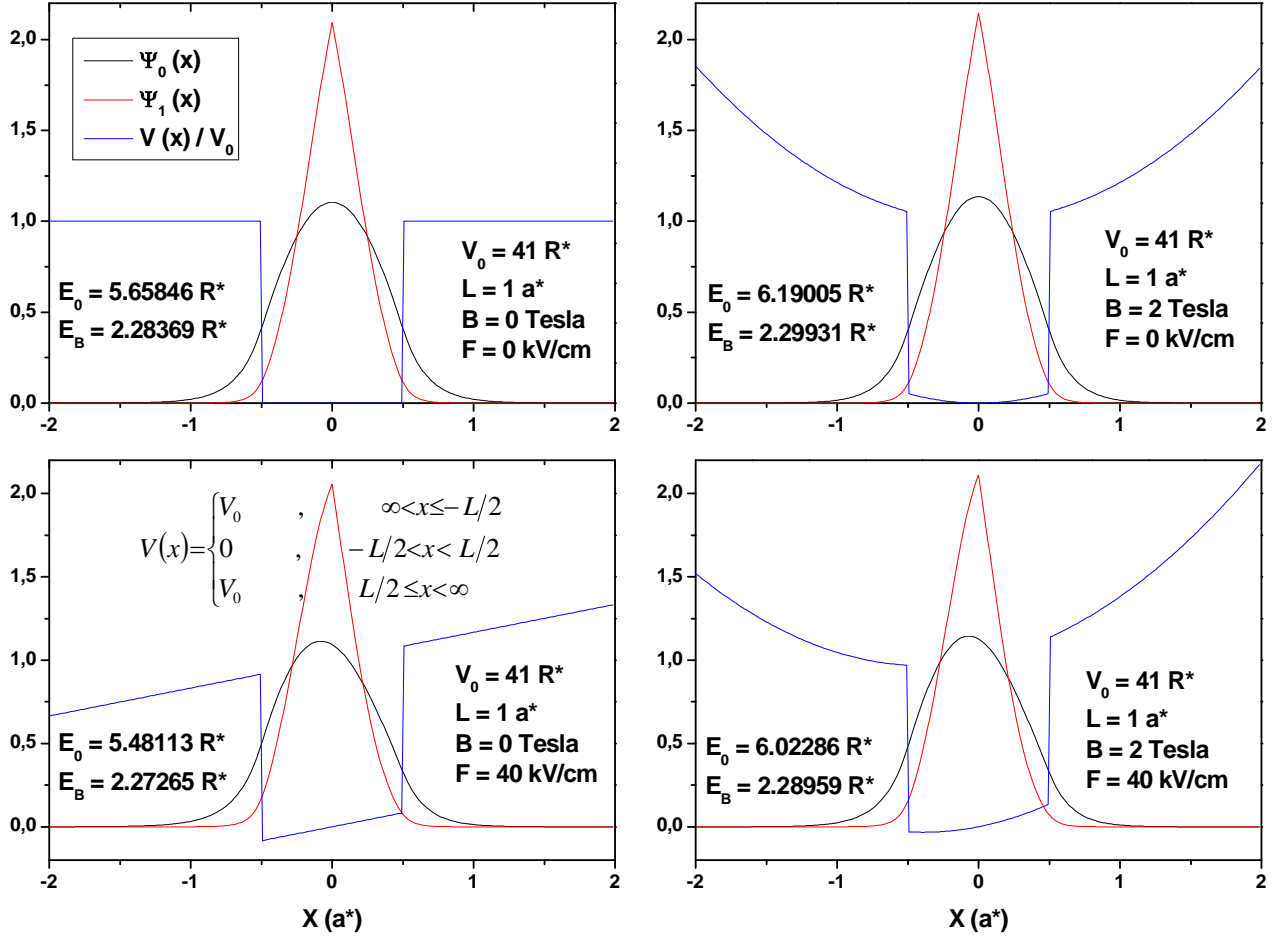
olur.

Tek çözümler ($A = 0$ ise $B \neq 0$)

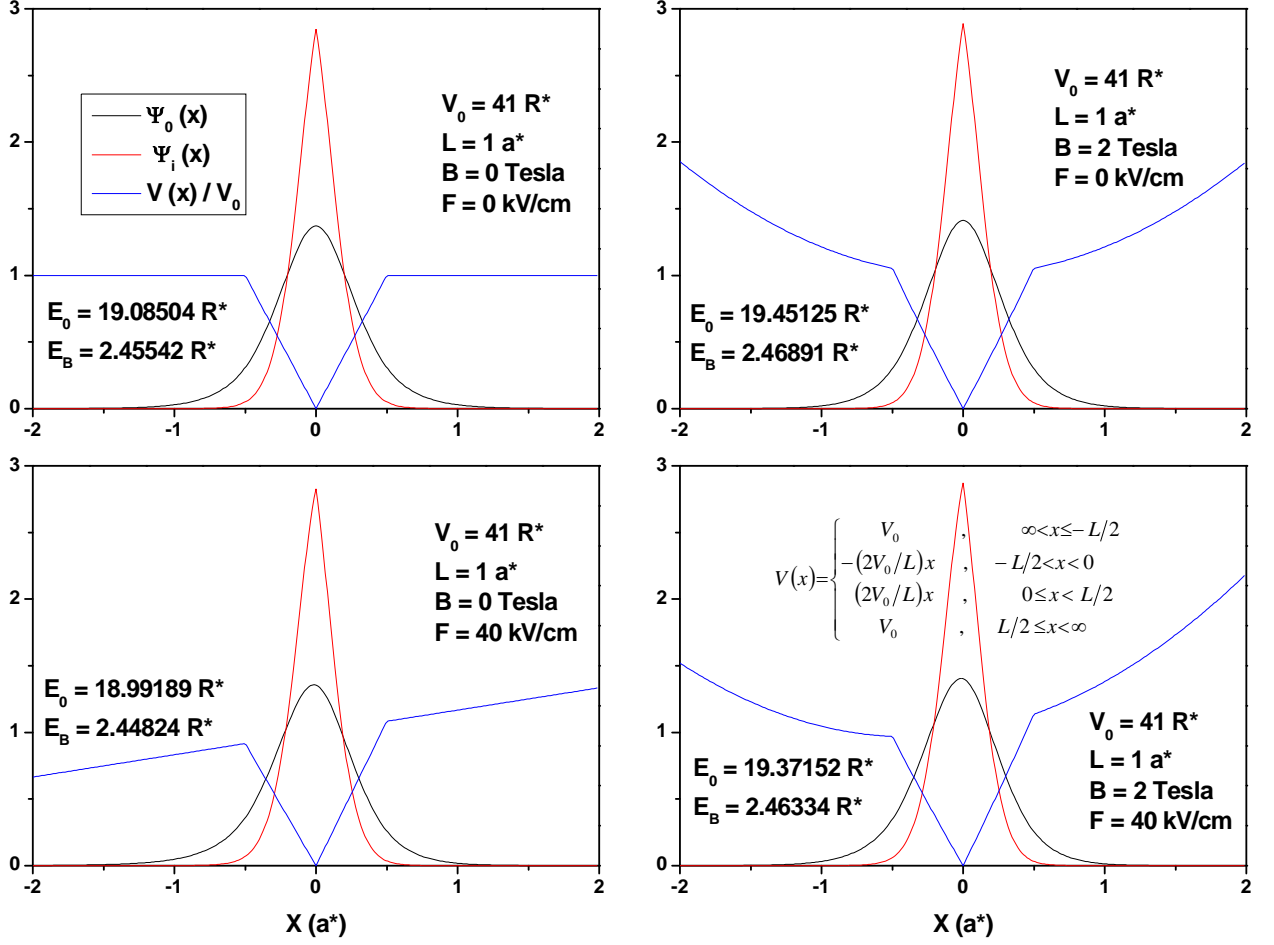
$\acute{ı}$ ile $\acute{ı}\acute{ı}$ ' den hesaplandığında $C_1 = -C_2$ olur. Denklem (2.1.a.32-33)' den, $K = -q \cot qL$ olmak üzere II. bölgedeki tek dalga fonksiyonu,

$$\Psi^+_{II}(x) = A \cos qx \quad (2.1.a.35)$$

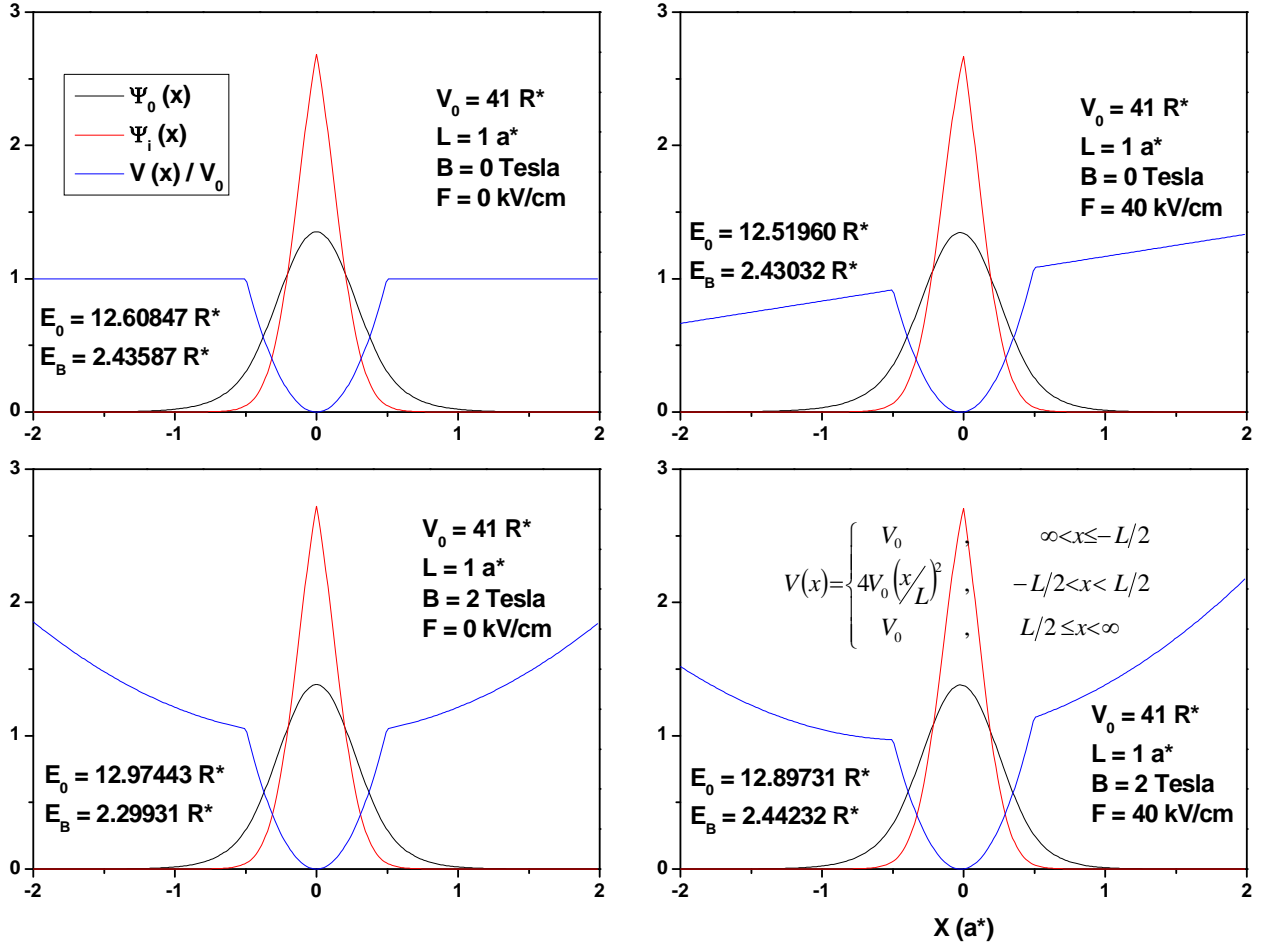
olur. (Karaođlu, 1994)



Şekil (2.2) : Elektrik ve manyetik alan etkisinde kare kuyu içerisindeki bir elektronun taban durum enerjisi ve bağlanma enerjileri ile birlikte elektronun normalize edilmiş bir boyutta dalga fonksiyonlar .

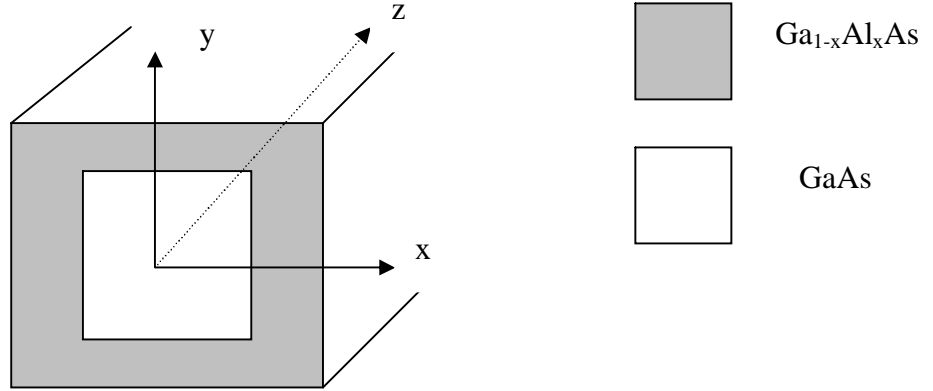


Şekil (2.3) : Elektrik ve manyetik alan etkisinde üçgen kuyu içerisindeki bir elektronun taban durum enerjisi ve bağlanma enerjileri ile birlikte elektronun normalize edilmiş bir boyutta dalga fonksiyonlar .



Şekil (2.4) : Elektrik ve manyetik alan etkisinde parabol kuyu içerisindeki bir elektronun taban durum enerjisi ve bağlanma enerjileri ile birlikte elektronun normalize edilmiş bir boyutta dalga fonksiyonlar .

2.1.b) Kuantum Telleri:



Şekil (2.1.b.1) : Kare kesitli kuantum telinin şematik gösterimi.

Kuantum tellerinde elektronun hareketi bir yönde serbesttir. Yukarıdaki şekilde verilen kuantum telinde elektron x ve y yönlerinde potansiyel engelleri ile hapsedilmiştir. Sonsuz kuantum teli için potansiyel

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & |x| \leq L_x/2 \quad \text{ve} \quad |y| \leq L_y/2 \\ \infty & |x| > L_x/2 \quad \text{ve} \quad |y| > L_y/2 \end{cases} \quad (2.1.b.1)$$

dir. Kuantum teli içindeki bir elektron için Schrödinger denklemini yazarsa,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_0(x, y, z) = E_0 \psi_0(x, y, z) \quad (2.1.b.2)$$

olur. z yönünde sınırlama olmadığı için elektron bu yönde serbest parçacık gibi davranır ve diğer yönlerde kuantize olur. Bu yüzden dalga fonksiyonu,

$$\psi_0(x, y, z) = \psi_0(x, y) \psi_0(z) \quad (2.1.b.3)$$

şeklinde alınarak Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\psi_0(x, y, z) = A \cos\left(\frac{\pi}{L_x} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_y} y\right) \exp(ik_z z) \quad (2.1.b.4)$$

olur. Elektronun taban durum enerjisi de,

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 \right] + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (2.1.b.5)$$

olarak bulunur. Sonlu kuantum telinin potansiyeli,

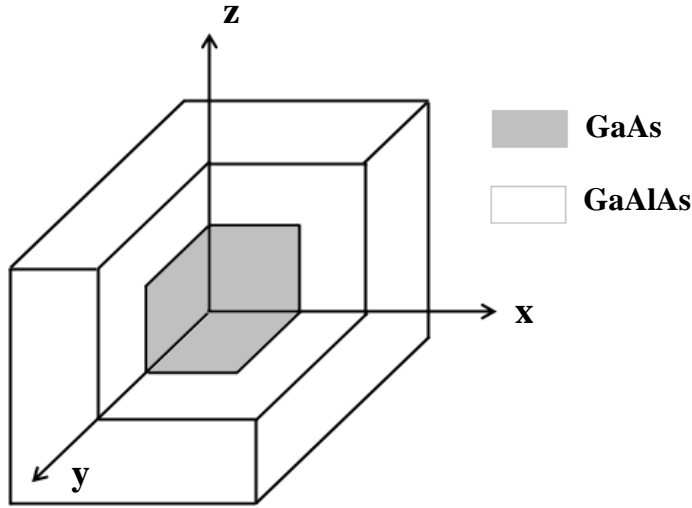
$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & |x| \leq L_x/2 \quad \text{ve} \quad |y| \leq L_y/2 \\ V_0 & |x| > L_x/2 \quad \text{ve} \quad |y| > L_y/2 \end{cases} \quad (2.1.b.6)$$

biçimindedir ve sonlu kuantum teli için Schrödinger denklemini,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (2.1.b.7)$$

olarak yazılabilir. Bu denklem analitik olarak çözülebilir. Ancak bazı değişik potansiyel profilleri için analitik çözüm çok zor veya imkansız olabilmektedir. Böyle durumlarda Runge-Kutta veya sonlu farklar yöntemi gibi nümerik yöntemler kullanılmaktadır.

2.1.c) Kuantum Noktalar :



Şekil (2.1.c.1) : Kübik kuantum noktasının şematik gösterimi.

GaAs içindeki bir elektronun etrafı $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ile çevrilmiş ve hareketi üç boyutta sınırlanmış ise bu sisteme GaAs kuantum noktası denir. Elektronların sınırlanmasından dolayı kuantum noktadaki enerji seviyeleri atomlarda olduğu gibi kuantize olur. Kuantum noktaları değişik biçimlerde üretilebilir ve iletkenlikleri yabancı atom katılmasıyla değiştirilebilir. Yukarıdaki şekilde verilen kuantum noktada elektron x, y ve z yönlerinde potansiyel engelleri ile hapsedilmiştir.

Sonsuz kuantum noktası için potansiyeli,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & |x| \leq L_x/2, |y| \leq L_y/2, |z| \leq L_z/2 \\ \infty & |x| > L_x/2, |y| > L_y/2, |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.1.c.1)$$

dir. Kuantum noktası içindeki bir elektron için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_0(x, y, z) = E_0 \psi_0(x, y, z) \quad (2.1.c.2)$$

şeklinde yazılır. Üç yönde sınırlama olduğu için elektron bu bölgede hapsolür ve bu bölge içerisinde kuantize olur. Bu durumunda dalga fonksiyonunu, Schrödinger denkleminde yararlanarak;

$$\psi_0(x, y, z) = A \cos\left(\frac{\pi}{L_x} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_y} y\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_z} z\right) \quad (2.1.c.3)$$

şeklinde yazılabilir. Elektronun taban durumundaki enerjisi de,

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2 \right] \quad (2.1.c.4)$$

olarak bulunur. Sonlu kuantum noktasının potansiyeli,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & |x| \leq L_x/2, |y| \leq L_y/2, |z| \leq L_z/2 \\ V_0 & |x| > L_x/2, |y| > L_y/2, |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.1.c.5)$$

biçimindedir ve sonlu kuantum noktası için Schrödinger denklemini

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (2.1.c.6)$$

olarak yazılır. Bu denklem analitik olarak çözülebilir. Ancak bazı değişik potansiyel profilleri için analitik çözüm çok zor veya imkansız olabilmektedir. Böyle durumlarda sonlu farklar yöntemi gibi nümerik yöntemler kullanılabilir.

2.2) Kuantum Noktas na Düzgün Elektrik Alan n Etkisi:

Yar iletken bir kristale büyütme yönünde bir elektrik alan uygulanmasıyla yük taşıyıcıları dağılımında değişmelerine neden olur ve enerji durumlarında kaymalara neden olur. Kuantum noktası içinde bulunan bir elektron, dışardan elektrik alan uygulanmasıyla potansiyel enerji kazanır (Karaoğlu vd. , 1993-1994). Elektrik alan uygulandığı zaman sistemin Hamiltoniyeni'ne bir elektrik alan terimi eklenir.

Bu elektrona etki eden elektriksel kuvvet, elektrik alan x doğrultusunda uygulandığında,

$$\hat{F} = |e|F\hat{x} \quad (2.2.1)$$

olur. Burada e elektronun elektrik yükünü ve F ise x yönünde uygulanan düzgün bir dış elektrik alan şiddetini göstermektedir. \hat{x} pozitif x eksen yönündeki birim vektördür. F elektrik alanından dolayı elektronun kazandığı potansiyel enerji,

$$V_B(x) = \int F dx = eFx = eEx \quad (2.2.2)$$

olur. Nümerik hesaplarda elektriksel potansiyel enerji,

$$eEx = \eta x \quad (2.2.3)$$

olarak alınmıştır. Yukarıdaki denklemde,

$$\eta = \frac{|e|a^x F}{R^*} = \frac{a^* F 0.01}{R^*} = \frac{F}{5,83} \quad (2.2.4)$$

dir. Bu çalışmada yukarıda belirtilen nümerik hesaplardaki kolaylığı sağlamak için elektrik alan birimi kV/cm olarak alınmıştır. Burada ϵ ve m^* sırasıyla kristalin dielektrik sabiti ve elektronun etkin kütesidir. Uzunluk birimi olarak Bohr yarıçap $a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2}$

ve enerji birimi olarak etkin Rydberg enerjisi $R^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}}$ olarak verilir. GaAs kristali için $\epsilon = 12.5$ ve $m^* = 0.067m_0$ (m_0 serbest elektron kütlesi) kullanılarak $a^* \cong 100A^*$ ve $R^* = 5.83meV$ olarak hesaplanır.

2.3) Kuantum Noktasına Düzgün Manyetik Alanın Etkisi

Burada nokta olduğu için sistem üç boyutta sınırlanmış olacaktır. Manyetik alan parabolik fonksiyon oluşturmaktadır. Bu durumda kristale manyetik alan uygulanması elektronik seviyelerin boyutluluğunu değiştirir ve durum yoğunluklarında yeni bir dağılıma yol açar. (Masale M. vd. 1992)

Düşük boyutlu yapılara düzgün bir manyetik alan ($\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$) uygulandığında genel Hamiltonyen (Karaoğlu 1994),

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{P} + \frac{|e|\hbar}{c} \vec{A} \right]^2 + V(x, y, z) \quad (2.3.1)$$

olarak verilir. Bu Hamiltonyende \vec{A} manyetik alanın vektör potansiyeli ve \vec{P} momentum olarak tanımlanır.

$\vec{B} = B\hat{z}$ yönünde bir manyetik alan uyguladığımızda, manyetik alan vektörü $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ olduğundan aşağıdaki denklemden belirlenir.

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} \quad (2.3.2)$$

Determinant açarsa,

$$B\vec{k} = \vec{i} \underbrace{\left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right)}_{B_x} - \vec{j} \underbrace{\left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right)}_{B_y} + \vec{k} \underbrace{\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)}_{B_z} \quad (2.3.3)$$

olur. Bu sistemler tüm koordinat sistemleri için geçerlidir. Manyetik alan vektörünün bileşenlerini öyle seçilmelidir ki yukarıdaki eşitliği vermeli. Bu durumda,

$$\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B \quad (2.3.4)$$

$$A_y = Bx \quad A_x = 0 \quad (\text{Ayar 1}) \quad (2.3.5)$$

$$A_y = \frac{1}{2} Bx \quad A_x = -\frac{1}{2} By \quad (\text{Ayar 2}) \quad (2.3.6)$$

$$A_y = 0 \quad A_x = By \quad (\text{Ayar 3}) \quad (2.3.7)$$

ayarlar ndan her hangi biri manyetik alan vektörü verecek şekilde istenildiği gibi seçilebilir. Burada önemli olan $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ durumunu sağlamasıdır. Bu çalışmada simetrik ayar olarak bilinen Ayar 2 kullanılmıştır.

$$\vec{A} = \left(\frac{1}{2} By, -\frac{1}{2} Bx, 0 \right) \quad (2.3.8)$$

Manyetik alanın etkisiyle oluşan vektör potansiyelinin seçilen bu ayar altında Hamiltonyen denklemi,

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{P}^2 + 2e\vec{A}\vec{P} + e^2\vec{A}^2 \right) + V(x, y, z) \quad (2.3.9)$$

olur. Burada simetrik ayar alt nda $\vec{A}\vec{P} = \vec{P}\vec{A}$ 'dır. Momentum işlemcisinin x ve y bileşenleri

$\vec{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ve $\vec{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ olarak tanımlandığından,

$$\vec{A}\vec{P} = \left(-\frac{1}{2} By \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} Bx \frac{\partial}{\partial y} \right) (-i\hbar)$$

$$\vec{A}\vec{P} = \frac{1}{2} B \left[\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) (-i\hbar) \right]$$

$$\vec{A} \cdot \vec{P} = \frac{1}{2} B [(xP_y - yP_x)] \quad (2.3.10)$$

$$\vec{A} \cdot \vec{P} = \frac{1}{2} B (L_z) \quad (2.3.11)$$

şeklinde belirlenir. Burada L_z aç sal momentumun z bileşenidir ve

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4} B^2 y^2 + \frac{1}{4} B^2 x^2 + 0$$

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4} B^2 e^2 (x^2 + y^2)$$

olur. Burada bulunan katkı terimleri $\frac{1}{4} B^2 e^2 (x^2 + y^2)$ ve $\frac{1}{2} B (L_z)$ Hamiltonyen denkleminde yazılırsa,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \frac{2e}{2m^*} \frac{1}{2} B L_z + \frac{1}{4} \frac{B^2 e^2}{2m^*} (x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (2.3.12)$$

olur. Taban durum çalışıldığında $m = 0 (m = -l, \dots, +l \rightarrow l = 0 (\text{taban durum}))$ değerini alır ve

$\frac{2e}{2m^*} \frac{1}{2} B L_z$ ifadesi gider. Hamiltonyen denkleminin son şekli yazılırsa,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \frac{1}{4} \frac{B^2 e^2}{2m^*} (x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (2.3.13)$$

halini alır ve bu denklemi Rydberg enerji birim sisteminde yazılacak olursa,

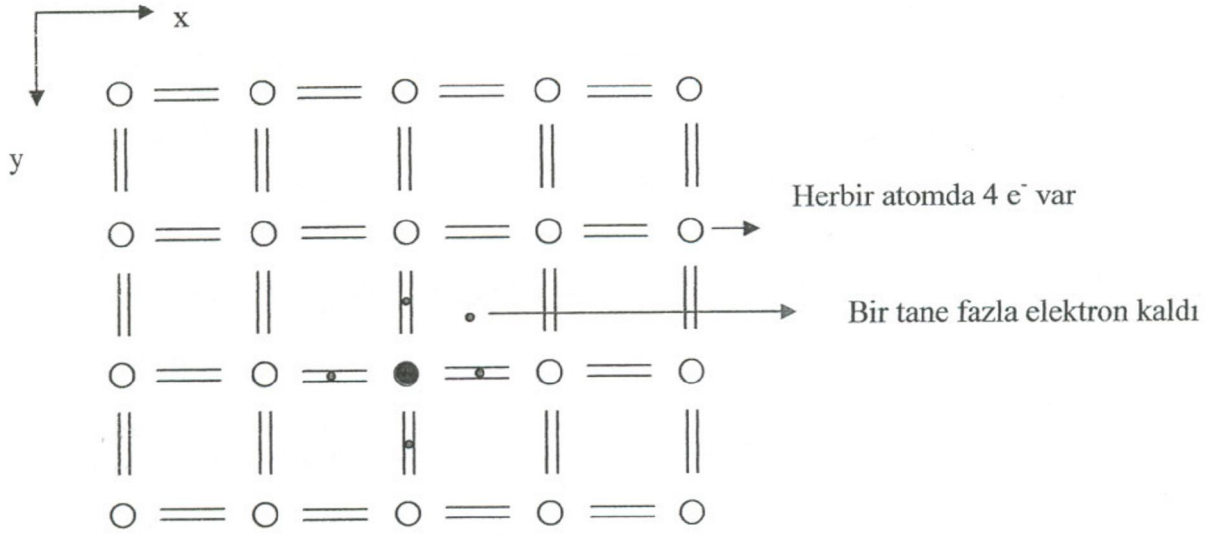
$$H = -\nabla^2 + \frac{\gamma^2}{4} (x^2 + y^2) + \gamma L_z + V(x, y, z) \quad (2.3.14)$$

durumuna gelir. Burada $\gamma = \frac{\hbar \omega_c}{2R^*}$, $\omega_c = \frac{eB}{m^* c}$ 'dir.

2.4) Kuantum Noktasındaki Yabancı Atom Problemi:

Düşük boyutlu yapılarda yarıiletken malzemelere yabancı atom katılmasıyla taşıyıcı sayısı ve dolayısıyla da iletkenlik artırılabilir. Yabancı atomların elektronik ve optik özelliklerinin anlaşılması düşük boyutlu yapılar kullanılarak üretilen cihazların optik ve iletim özelliklerini anlamak için çok önemlidir. (Niculescu E. C. vd. , 2001)

Örneğin iki boyutta 4 elektronlu bir sisteme 5 elektronlu bir yabancı atom eklendiğinde varsayalım.



Şekil (2.4.1) : İki boyutta 4 elektronlu bir sisteme 5 elektronlu bir yabancı atom eklendiği durum.

Bir şekilde ortamdaki atomu çıkarıp yerine bir başka atom konulursa (5 değerli hidrojenimsi) bir elektron boşta kalır. (Kittel C. , 1996)

Düşük boyutlu yapılara yabancı atom katıldığında sistemin Hamiltonyeni'ne ek bir terim gelir. Bu terim elektron ve yabancı atom arasındaki Coulomb etkileşme terimidir. Rydberg enerji birim sisteminde sonlu kuantum noktası içinde bir yabancı atom katıldığında sistemin Hamiltonyeni

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + V(x, y, z) \quad (2.4.1)$$

olarak yazılır. Elektron çevresindeki atomlar ile etkileşmesinden dolayı kütlelerinde değişim olur. Bunun için elektronun kütlesi m^* etkin kütle ile tanımlanır. GaAs için etkin kütle $m^* = 0,067m_0$ ' dir. Denklem (2.4.1)' i Rydberg enerji birim sisteminde,

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + V(x, y, z) \quad (2.4.2)$$

şeklinde yazılır. Yabancı atoma bağlı elektronun enerji öz değerlerini ve dalga fonksiyonlarını bulmak için varyasyonel yöntem başvurulur. Buna göre yabancı atom için deneme dalga fonksiyonu,

$$\Psi_i(x, y, z) = N\Psi_0(x, y, z)\exp\left[-\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}/\lambda\right] \quad (2.4.3)$$

olarak seçilebilir. Buradaki λ varyasyon parametresi, $\Psi_0(x, y, z)$ yabancı atom yokken taban durumu dalga fonksiyonudur. Yabancı atom bağlanma enerjisi E_B , yabancı atom yokken sistemin taban durum enerjisi ile yabancı atom varken sistemin taban durum enerjisi arasındaki fark olarak tanımlanır. Buna göre

$$E_B = E_0 - \left[\left\langle \frac{\Psi_i(x, y, z)H\Psi_i(x, y, z)}{\Psi_i(x, y, z)\Psi_i(x, y, z)} \right\rangle \right]_{\lambda_{\min}} \quad (2.4.4)$$

olarak yazılabilir. (Ribeiro F. J. Vd., 1994 ; Chuu D. S. Vd., 1992)

2.5) Varyasyon Yöntemi :

Varyasyon yöntemi, dalga fonksiyonunu geliştirmeyi ve taban durum enerjisini minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Bu yaklaşık yöntem sistemin en düşük enerji durumuna karşı gelen özfonksiyonu biçimi hakkında tahminde bulunabildiğimiz özdeğer problemlerine uygulanabilir.

Varyasyon işlemi uygulanacağı sistemin herhangi bir Ψ durumunda enerjinin beklenen değeri için,

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi(x, y, z) | H | \Psi(x, y, z) \rangle}{\langle \Psi(x, y, z) | \Psi(x, y, z) \rangle} \quad (2.5.1)$$

eşitliği yazılabilir. Ψ fonksiyonu normlanmışsa payda bire eşit olur. Yabancı atomun etkisiyle oluşan hamiltonyen

$$H = -\nabla^2 + V_T(x) - \frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (2.5.2)$$

ile yazılır. Elektronun yabancı atom yokken ki dalga fonksiyonu $\Psi_0(x)$ kabul edip yabancı atomla etkileşmesinden sonra oluşan dalga fonksiyonunu,

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\lambda}} \quad (2.5.3)$$

şeklinde yazılabilir. Burada eksponansiyelli ifade deneme fonksiyonu olup λ ise varyasyon parametresidir. Doğadaki sistemler her zaman enerjilerini en düşük seviyede tutmak istemesinden yola çıkarak minimum λ parametresini nümerik yöntemle hesaplayıp elektronun enerjisini ve buradan yabancı atoma bağlanma enerjisi hesaplanabilir. Bunun için,

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi(x, y, z) | H | \Psi(x, y, z) \rangle}{\langle \Psi(x, y, z) | \Psi(x, y, z) \rangle} \Bigg|_{\lambda_{\min}} \quad (2.5.4)$$

denklemini hesaplanacak olursa,

$$\langle E \rangle = \frac{\left\langle \Psi(x, y, z) \left| -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_T(x) - \frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right| \Psi(x, y, z) \right\rangle}{\langle \Psi(x, y, z) | \Psi(x, y, z) \rangle} \quad (2.5.5)$$

$$\langle E \rangle = \frac{\left\langle \Psi(x, y, z) \left| -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_T(x) \right| \Psi(x, y, z) \right\rangle}{\langle \Psi(x, y, z) | \Psi(x, y, z) \rangle} + \frac{\left\langle \Psi(x, y, z) \left| -\frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right| \Psi(x, y, z) \right\rangle}{\langle \Psi(x, y, z) | \Psi(x, y, z) \rangle} \quad (2.5.6)$$

olur. Buradan elektronun yabancı atom varken ki enerjisi,

$$E_{impurity} = E_0 + \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\left\langle \Psi(x, y, z) \left| -\frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right| \Psi(x, y, z) \right\rangle}{\langle \Psi(x, y, z) | \Psi(x, y, z) \rangle} \quad (2.5.7)$$

olur. Bağlanma enerjisini belirlemek için yabancı atom yokken ki taban durum enerjisinden enerjinin farkı alınmalı. Bu işlem yapılacak olursa,

$$E_{imp} = E_0 + \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\left\langle \Psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\lambda}} \left| -\frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right| \Psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\lambda}} \right\rangle}{\left\langle \Psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\lambda}} \left| \Psi_0(x) e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\lambda}} \right\rangle} \quad (2.5.8)$$

$$E_b = E_0 - E_{imp} \quad (2.5.9)$$

$$E_b = -\frac{1}{\lambda^2} - \frac{\left\langle \Psi_0(x)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \left| -\frac{2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \right| \Psi_0(x)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \right\rangle}{\left\langle \Psi_0(x)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \left| \Psi_0(x)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\lambda}} \right\rangle} \quad (2.5.10)$$

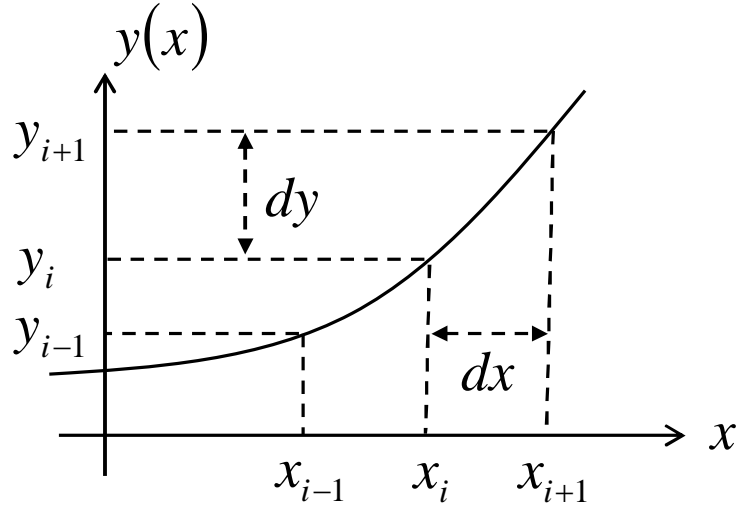
elde edilir. Bu denklem elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisini verir.

BÖLÜM 3: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILARIN ÇÖZÜMÜ İÇİN SAYISAL YÖNTEM

Düşük boyutlu yapıları incelemek için çeşitli sayısal yöntemler vardır. Bunlardan en çok kullanılanlar Runge-Kutta ve sonlu farklar yöntemleridir. Bu çalışmada son yıllarda kullanılan oldukça yaygın hale gelen sonlu farklar yöntemini kullanıldı. Elektronun yabancı bir atoma bağlanma enerjisi varyasyon yöntemi ile hesaplandı.

3.1) Sonlu Farklar Yöntemi:

Sonlu farklar yöntemi, analitik olarak çözümü mümkün olan veya olmayan diferansiyel denklemlerin çözümlerini yaklaşık sayısal olarak elde etmemizi sağlayan bir yöntemdir. Genellikle interpolasyon, türev ve integral alma işlemleri fonksiyon yerel olarak öz polinom ile temsil etmeye dayanır. Özellikle türev alma işleminde fonksiyonun alacak türev mertebesine kadar türevlenebilir olması gereklidir. İntegralde ise fonksiyonun süreklilik şartı aranmaz.



Şekil (3.1.1) : Sonlu farklar yöntemi ile fonksiyonun gösterimi.

3.1.a) İleri fark operatörü:

$$y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x} \quad (3.1.a.1)$$

$$y''_i = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (3.1.a.2)$$

3.1.b) Geri fark operatörü:

$$y'_i = \frac{y_{i-1} - y_i}{\Delta x} \quad (3.1.b.1)$$

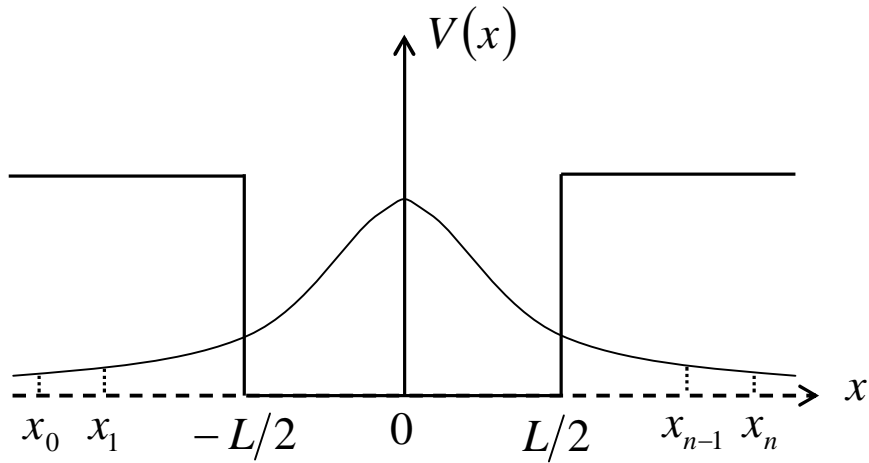
$$y''_i = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{\Delta x^2} \quad (3.1.b.2)$$

3.1.c) Merkezi farklar formülü:

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x} \quad (3.1.c.1)$$

$$y''_i = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{\Delta x^2} \quad (3.1.c.2)$$

3.2) Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Kuyular na Uygulanışı:



Şekil (3.2.1) : Sonlu kuantum kuyusuna sonlu farklar yönteminin uygulanışı.

Kuantum kuyu çözümleri için Schrödinger denklemini çözmemiz gerekir. Buna göre,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\Psi(x) = 0 \quad (3.2.1)$$

Denklemini a^* ve R^* birimlerini kullanarak tekrar yazılrsa,

$$-\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\Psi(x) = 0 \quad (3.2.2)$$

olur. Kuantum kuyusunu çözmek için ilk önce kuyuyu dx eşit aralıklarıyla $i = 1, 2, \dots, n$ eşit parçaya bölünür. i . nokta için denklem (3.1.c.2)'yi Schrödinger denklemine (denklem (3.2.2)) uyarlanrsa,

$$-\frac{\Psi_{i-1} - 2\Psi_i + \Psi_{i+1}}{dx^2} + [V(x_i) - E]\Psi_i = 0 \quad (3.2.3)$$

ile yazılır. $i = 1$ için (3.2.3) denklemini yazılrsa,

$$-\frac{\Psi_0 - 2\Psi_1 + \Psi_2}{dx^2} + [V(x_1) - E]\Psi_1 = 0 \quad (3.2.4)$$

olur. Burada Ψ_0 dalga fonksiyonu sonsuzdaki değeri olduğundan sıfır olur ($\Psi_0 = 0$) ve bu koşula göre (3.2.4) denklemini düzenlenecek olursa,

$$-\frac{1}{dx^2} [(-2 - V(x_1)dx^2)\Psi_1 + \Psi_2] = E\Psi_1 \quad (3.2.5)$$

elde edilir. $i = 2$ için (3.2.3) denklemini tekrar yazılrsa,

$$-\frac{1}{dx^2} [(\Psi_1 - (2 + V(x_2)dx^2)\Psi_2 + \Psi_3)] = E\Psi_2 \quad (3.2.5)$$

olur. $i = 3$ için aynı işlem tekrarlanırsa,

$$-\frac{1}{dx^2} [(\Psi_2 - (2 + V(x_3)dx^2)\Psi_3 + \Psi_4)] = E\Psi_3 \quad (3.2.6)$$

belirlenir ve benzer şekilde n nokta için n tane denklem yazılır. Bu denklemleri de aşağıdaki gibi matris şeklinde yazılabilir.

$$-\frac{1}{dx^2} \begin{bmatrix} -2-V(x_1)dx^2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & -2-V(x_2)dx^2 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 1 & -2-V(x_3)dx^2 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & -2-V(x_n)dx^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Psi_n \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Psi_n \end{bmatrix} \quad (3.2.7)$$

Bu matrisin çözümü E_n enerji özdeğerleri ve Ψ_n dalga fonksiyonları verir.

3.3) Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Noktalarına Uygulanışı:

Kuantum noktası içerisindeki bir elektron üç boyutta sınırlandırıldığından elektronun enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarının bulunabilmesi için Schrödinger denklemi üç boyutlu tanımlanır. Rydberg enerji birim sisteminde kuantum noktası için Schrödinger denklemini şöyle yazılır.

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E_T(x, y, z) \psi(x, y, z) \quad (3.3.1)$$

Bu denklemde toplam potansiyel,

$$V(x, y, z) = V(x) + V(y) + V(z) \quad (3.3.2)$$

ile tanımlanır. Dalga fonksiyonu,

$$\psi(x, y, z) = \Psi(x)\Psi(y)\Psi(z) \quad (3.3.3)$$

olarak tanımlanır ve toplam enerjisi,

$$E_T(x, y, z) = E_x + E_y + E_z \quad (3.3.4)$$

ile gösterilir.

3.2.a) Elektrik alan etkisi:

Elektrik alan etkisi altında, Rydberg enerji birim sisteminde kuantum noktası için Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_T(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E_T(x, y, z) \psi(x, y, z) \quad (3.3.5)$$

olar ve toplam potansiyel enerji,

$$V_T(x, y, z) = V(x, y, z) + V_E \quad (3.3.6)$$

ile hesaplanır. Burada elektrik alanın oluşturduğu potansiyel $V_E = \eta x$ ' dir ve Rydberg enerji

birim sisteminde $\eta = \frac{F}{5,83}$ ' dır. F elektrik alan şiddetinin birimi ise kV/cm' dir.

3.3.b) Manyetik alan etkisi:

Manyetik alan etkisi altında, Rydberg enerji birim sisteminde kuantum noktası için Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_T(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E_T(x, y, z) \psi(x, y, z) \quad (3.3.b.1)$$

olar ve toplam potansiyel enerji,

$$V_T(x, y, z) = V(x, y, z) + V_B \quad (3.3.b.2)$$

ile hesaplanır. Burada manyetik alanın oluşturduğu potansiyel $V_B = \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2)$, dir ve Rydberg enerji birim sisteminde $\gamma = 1.480 \times B$ dir. B manyetik alan şiddetinin birimi ise Tesla' dır.

3.3.c) Yabancı atom etkisi :

Yabancı atom etkisi altında, Rydberg enerji birim sisteminde kuantum noktası için Schrödinger denklemi,

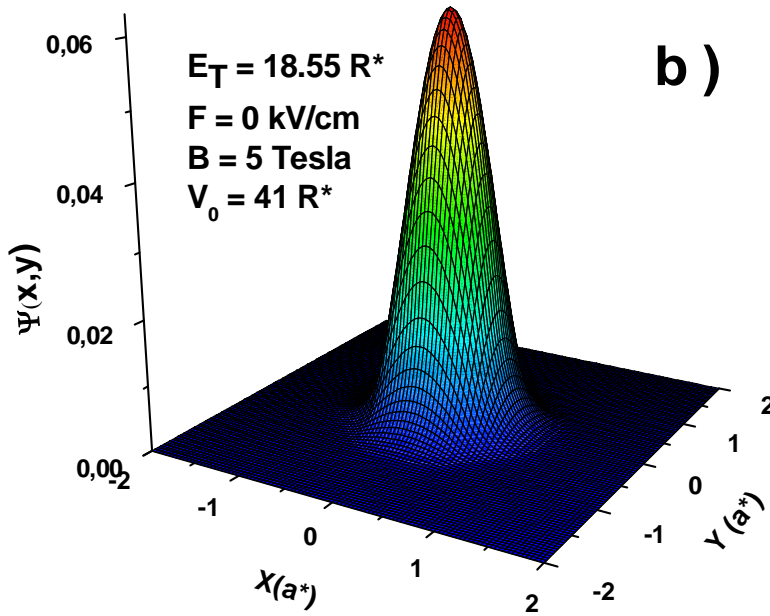
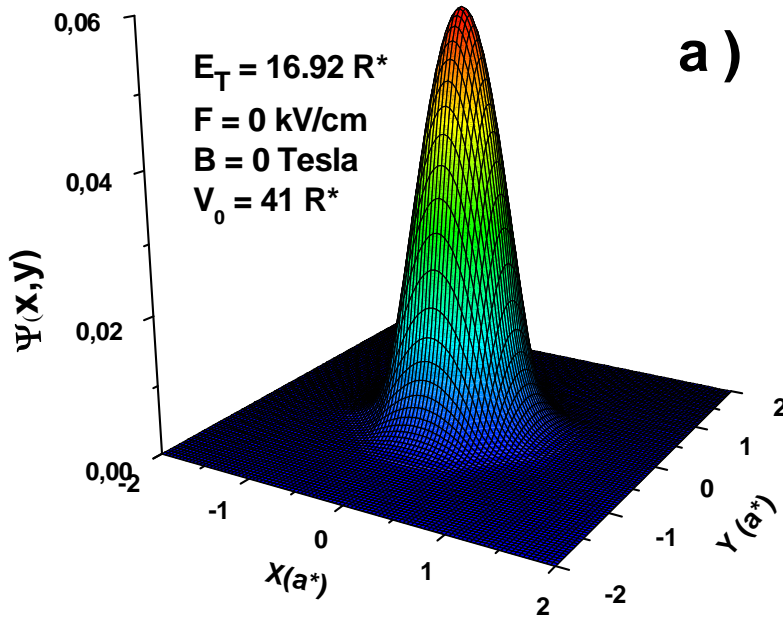
$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_T(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E_T(x, y, z) \psi(x, y, z) \quad (3.3.c.1)$$

olar ve toplam potansiyel enerji,

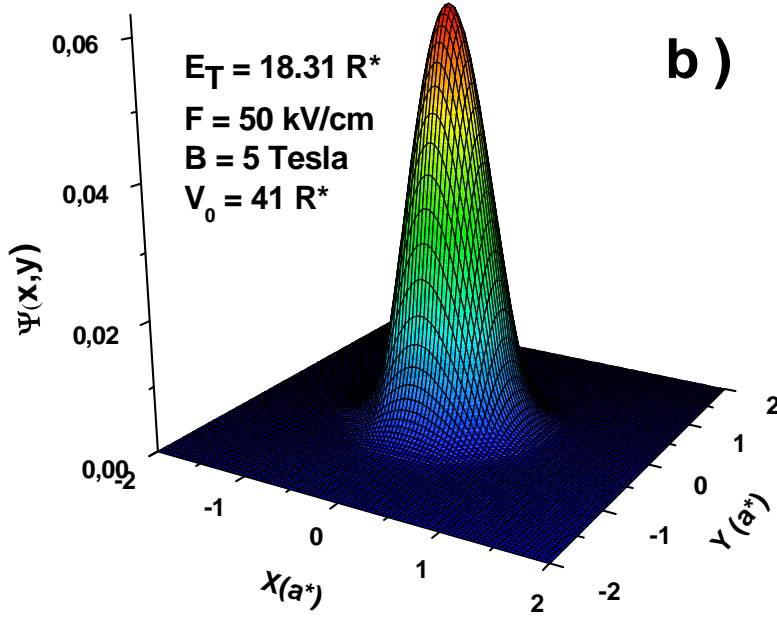
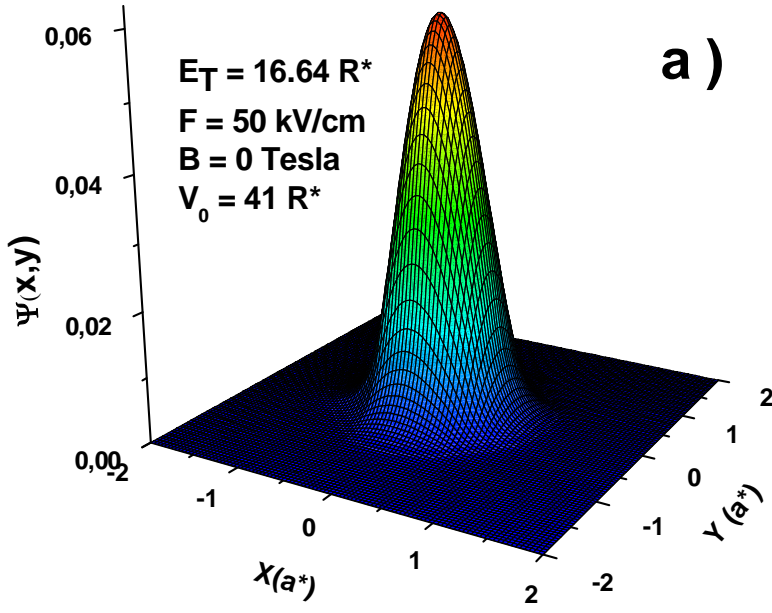
$$V_T(x, y, z) = V(x, y, z) + V_i \quad (3.3.c.2)$$

ile hesaplanır. Burada yabancı atomun oluşturduğu potansiyel

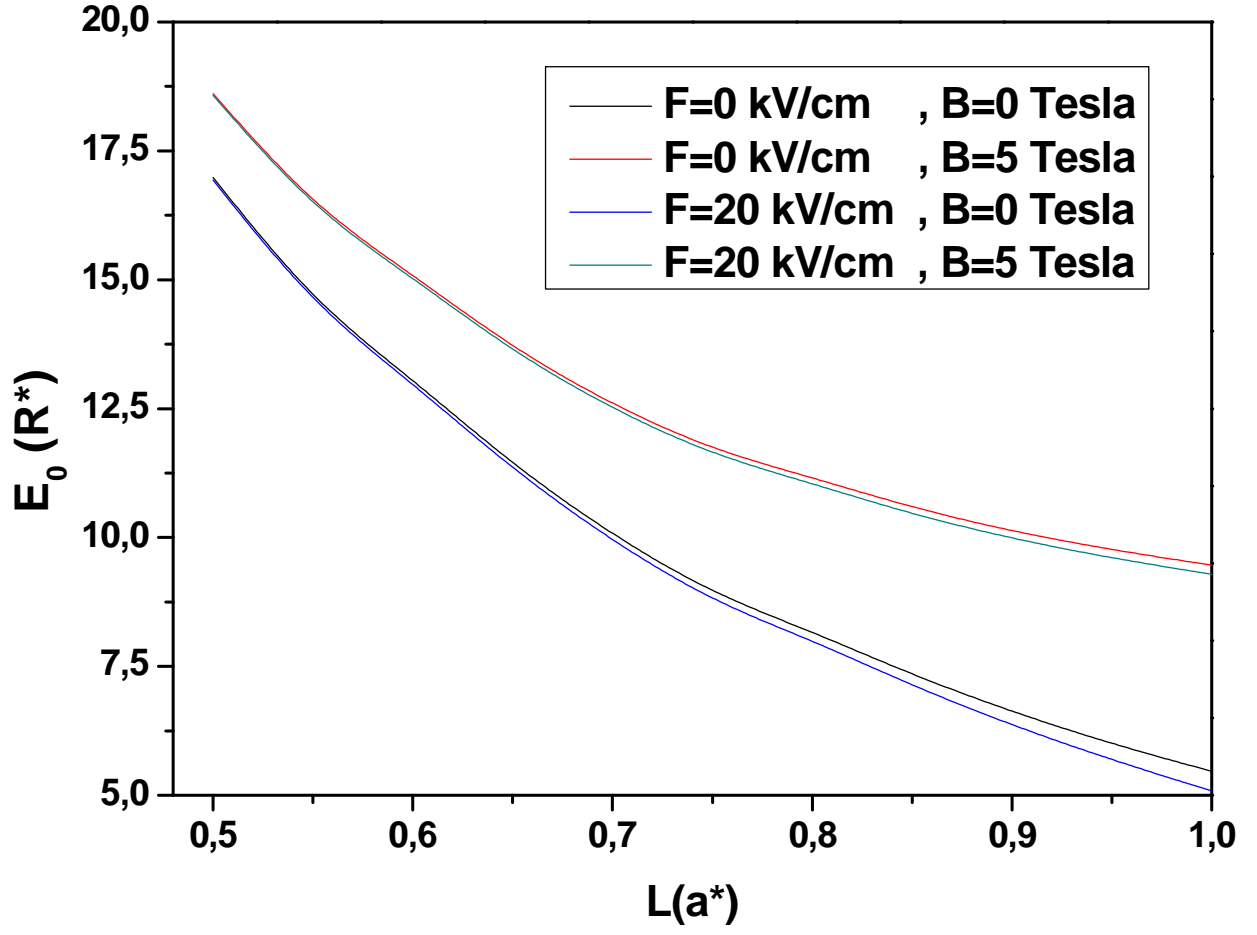
$$V_i = -\frac{2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}}, \text{ dir.}$$



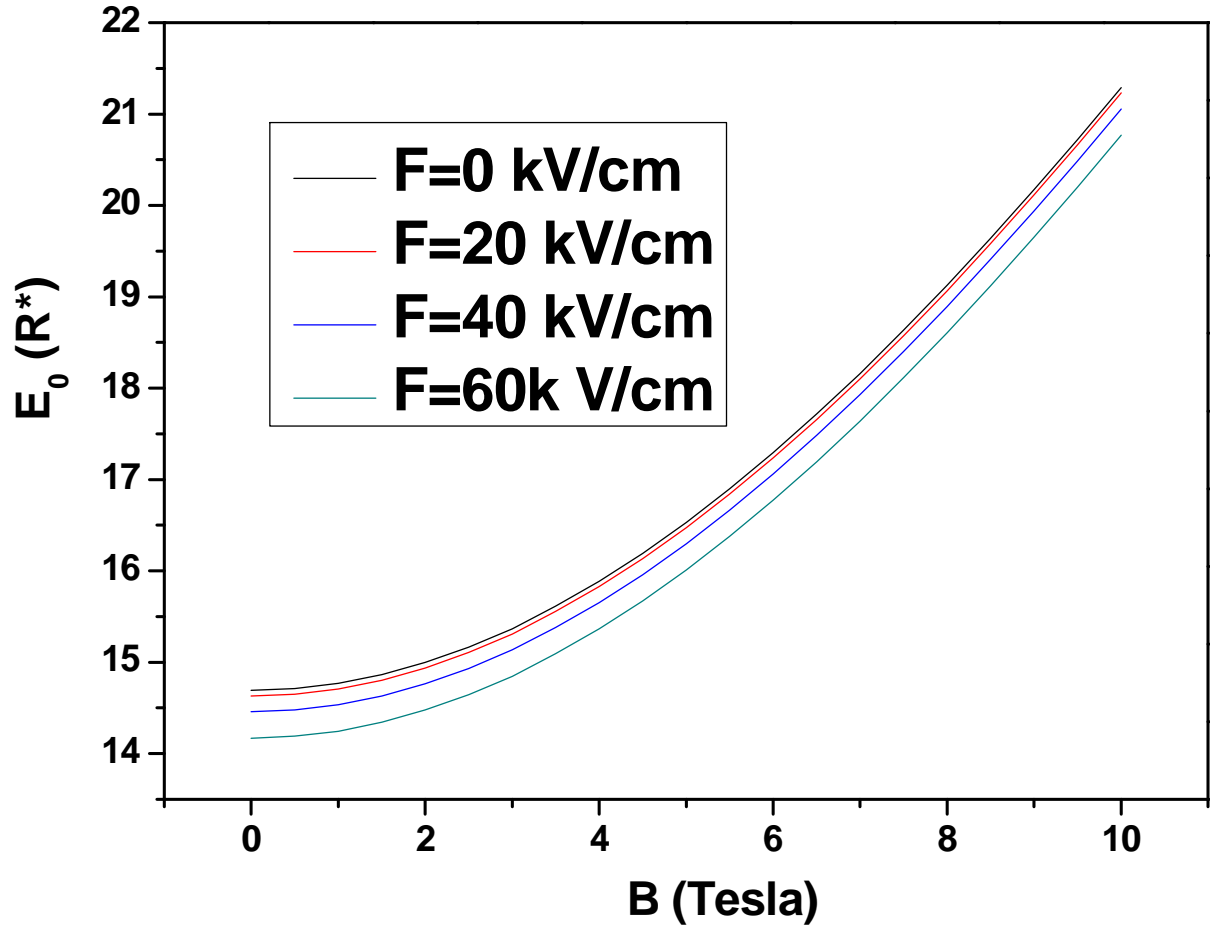
Şekil (3.1) : Kübik kuantum noktas nda, a) $F=0\text{kV/cm}$, $B=0\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$ ve $L=1a^*$, b) $F=0\text{kV/cm}$, $B=5\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$ ve $L=1a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.



Şekil (3.2) : Kübik kuantum noktası nda, a) $F = 50 \text{ kV/cm}$, $B = 0 \text{ Tesla}$, $V_0 = 41 R^*$ ve $L = 1 a^*$, b) $F = 50 \text{ kV/cm}$, $B = 5 \text{ Tesla}$, $V_0 = 41 R^*$ ve $L = 1 a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.



Şekil (3.3) : Kübik kuantum noktas nda $F=0; 20kV/cm$, $B=0; 5Tesla$ ve $V_0=41R^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun enerjisinin kübik noktanın genişliğine göre değişimi.

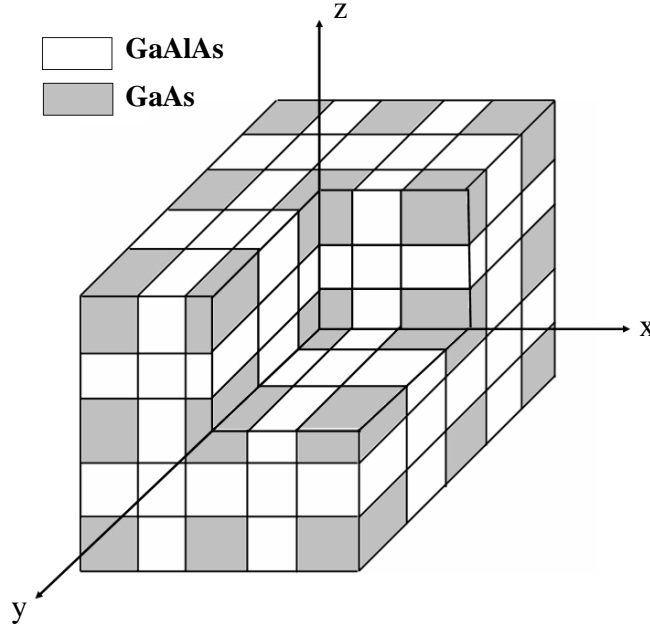


Şekil (3.4) : Kübik kuantum noktas nda $F=0 ;20 ;40 ;60kV/cm$, $L=1a^*$ ve $V_0=41R^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun enerjisinin manyetik alana göre değişimi.

BÖLÜM 4: İÇ İÇE KUANTUM NOKTALARI

Bu bölümde iç içe kübik kuantum noktasında, elektrik ve manyetik alan altında elektronun dalga fonksiyonunun ve taban durum enerjisinin değişimleri incelendi.

4.1) İç içe kübik kuantum noktasında elektrik ve manyetik alan etkisi:



Şekil (4.1.1) : Dış yüzeyi GaAlAs maddesi ile kaplı iç içe kübik kuantum noktası.

Bu bölümde elektrik ve manyetik alan şiddetine ve bariyer genişliğine bağlı olarak şekil (4.1.1) de gösterilen kübik kesitli iç içe kuantum noktasında taban durum enerjisi hesaplanmıştır. Şekil (4.1.2)'de, x eksenine göre potansiyel profil kesiti vardır.

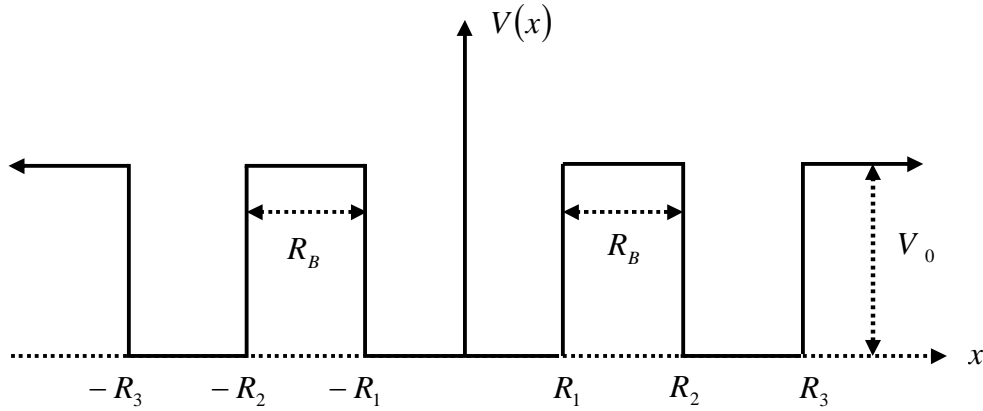
Etkin kütle yaklaşımı içinde z eksenini boyunca uzanan kübik iç içe kuantum noktasına dik olarak x yönünde elektrik alan uygulaması durumunda sistemin Hamiltoniyeni,

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + |e|Fx + V(x, y, z) \quad (4.1.1)$$

olarak yazılabilir. Burada $\vec{A} = \left(-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0 \right)$ simetrik ayar alınarak, manyetik alan $\vec{B} = (0, 0, B)$ yönünde uygulanmıştır. Sistemin yapısından dolayı oluşan potansiyel enerji

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq R_1 \\ 0, & |x| \geq R_2 \text{ and } |x| \leq R_3 \\ V_0, & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad (4.1.2)$$

ile tanımlanır. $V(y)$ ve $V(z)$ 'de aynı şekilde tanımlanırlar. Burada R_1 , R_2 ve R_3 yapıyı oluşturan bariyer duvarlarının yerlerini tanımlar ve şekil (4.1.2)'de gösterilmiştir.



Şekil (4.1.2) : İç içe kuantum noktasının malzemelerin yapısından oluşan x yönündeki potansiyel enerji.

Sistemin Hamiltonyen' i uzunluk birimi olarak a^* , etkin Bohr yarıçapı ve enerji birimi olarak R^* Rydberg enerji birim sisteminde,

$$H = -\nabla^2 + \eta x + \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2) + \gamma L_z + V(x, y, z) \quad (4.1.3)$$

olarak verilir. Burada $\eta = |e|a^*F(kV/cm)/R^*$ (F elektrik alan şiddeti) ve $\gamma = e\hbar B/2m^*cR^*$ (B manyetik alan şiddeti) dir. L_z açıl momentum operatörünün z bileşenidir ve taban durumu için sferikdir. Burada elektronun hareketi x, y ve z yönlerinde sferiktir ve taban durum enerjisi için düzgün elektrik ve manyetik alan varlığında elektronun hamiltonyen' i

$$H_1 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \eta x + \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (4.1.4)$$

şeklinde tanımlanır.

4.2) İç içe kübik kuantum noktasında yabancı atom etkisi:

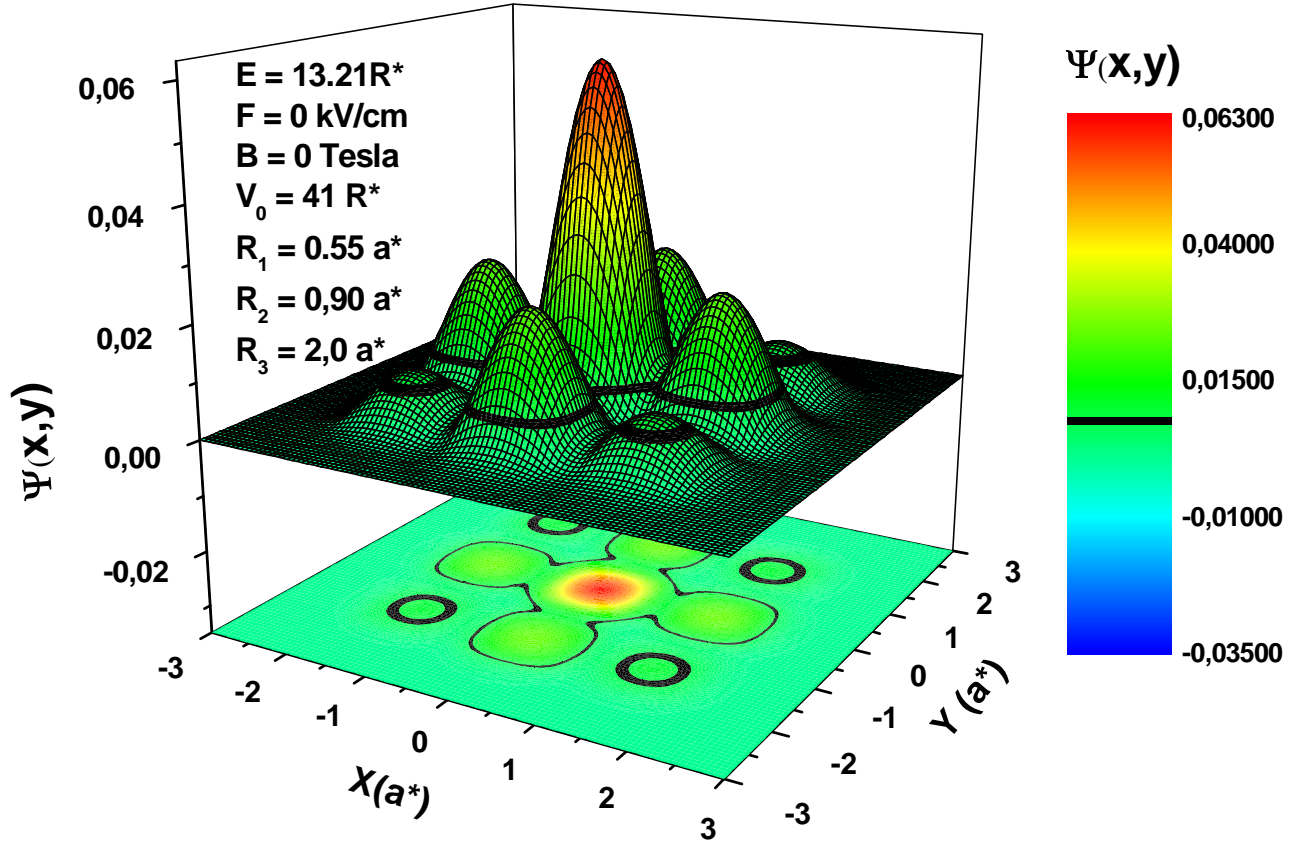
Sisteme (x_i, y_i, z_i) noktasında bulunan bir yabancı atom katılırsa bu durumda Hamiltonyen'i

$$H_2 = H_1 - \frac{2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (4.2.1)$$

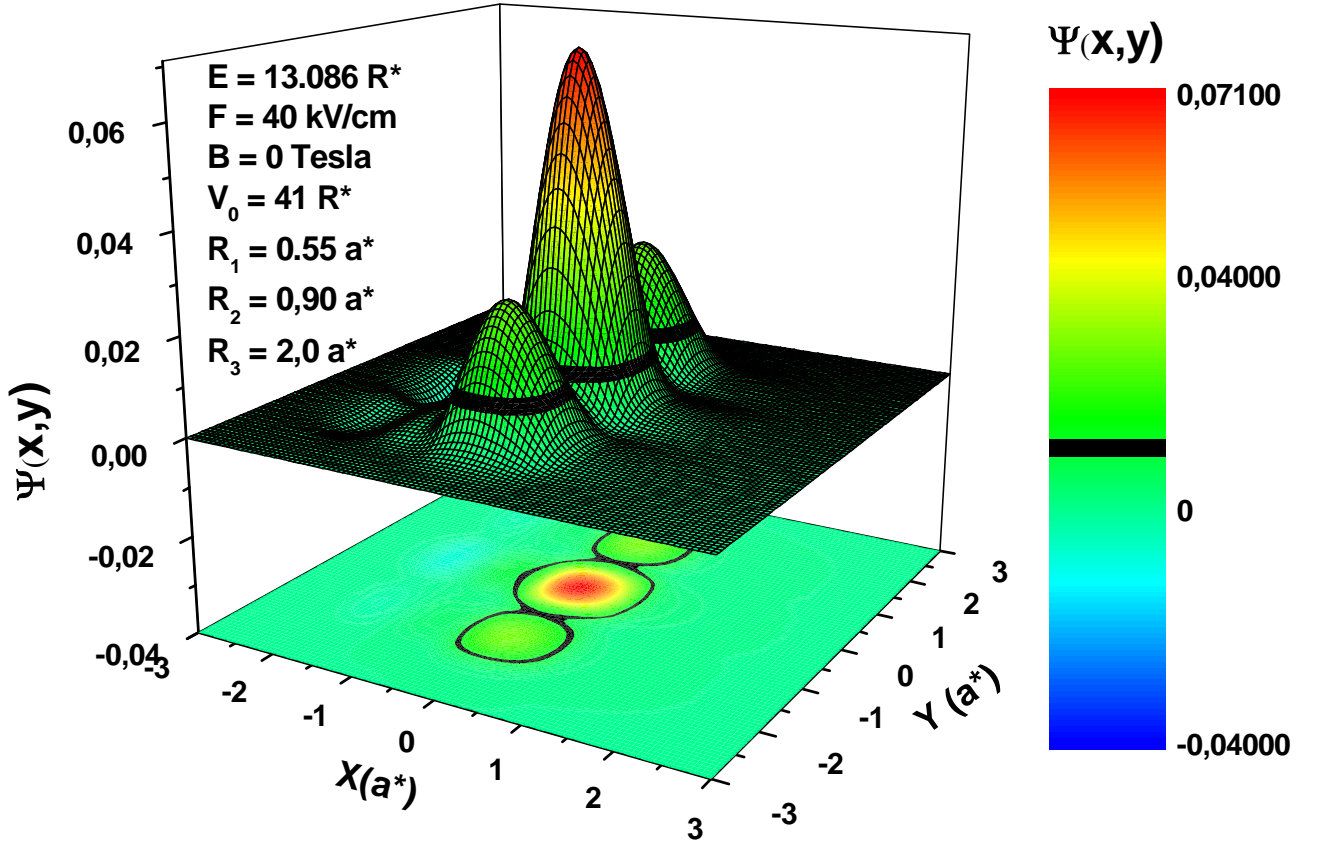
Rydberg enerji birim sisteminde alınır. Burada H_1 elektronun taban durumundaki Hamiltonyen'idir (elektrik ve manyetik alan varlığında). Elektronla yabancı atom arasındaki etkileşmeyi anlatan terim ise $\frac{2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}}$ ' dir. Elektronun, yabancı atom yokken taban durum enerjisi (E_1) ile yabancı atom varken taban durumu enerjisi (E_2) arasındaki fark bağlanma enerjisini (E_B) verir ve

$$E_B = E_1 - E_2 \quad (4.2.2)$$

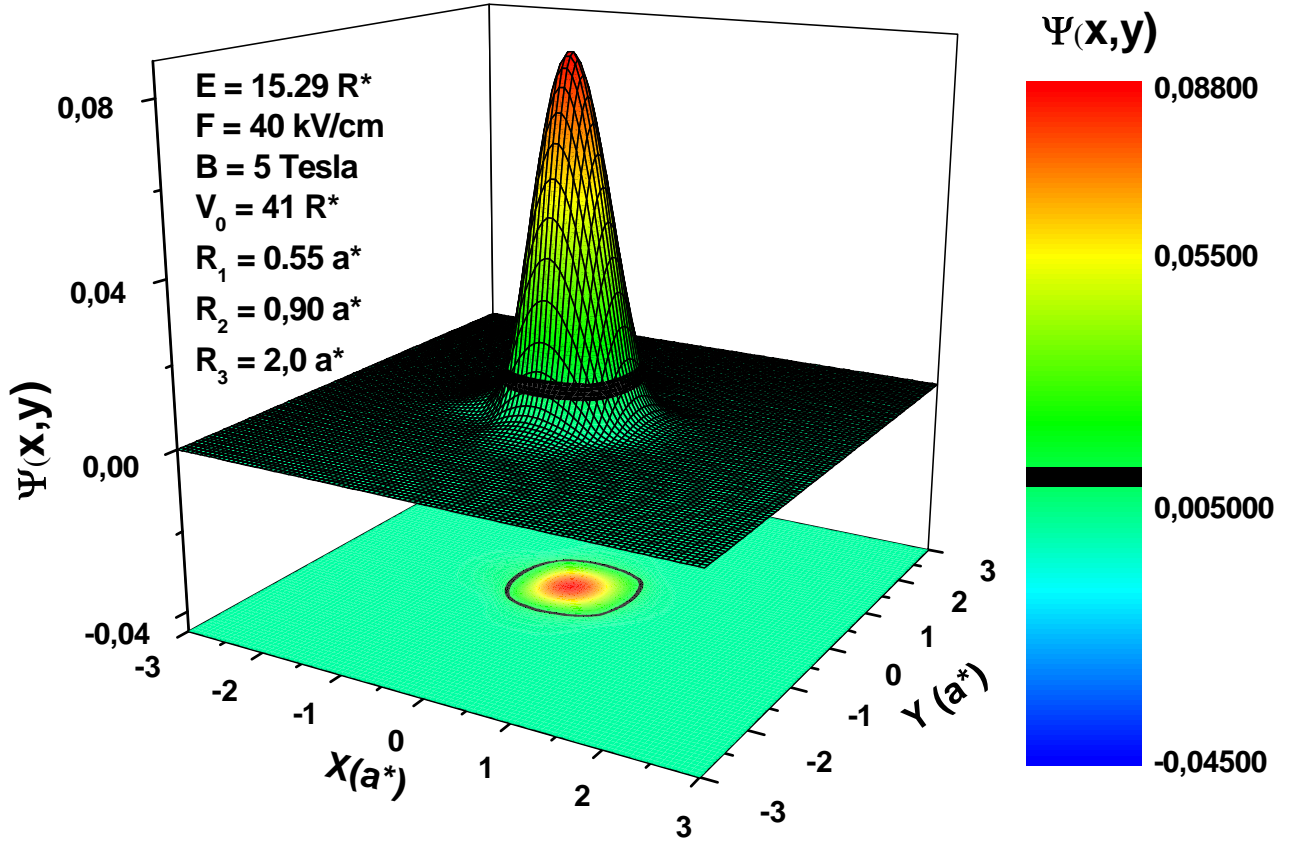
ile hesaplanır.



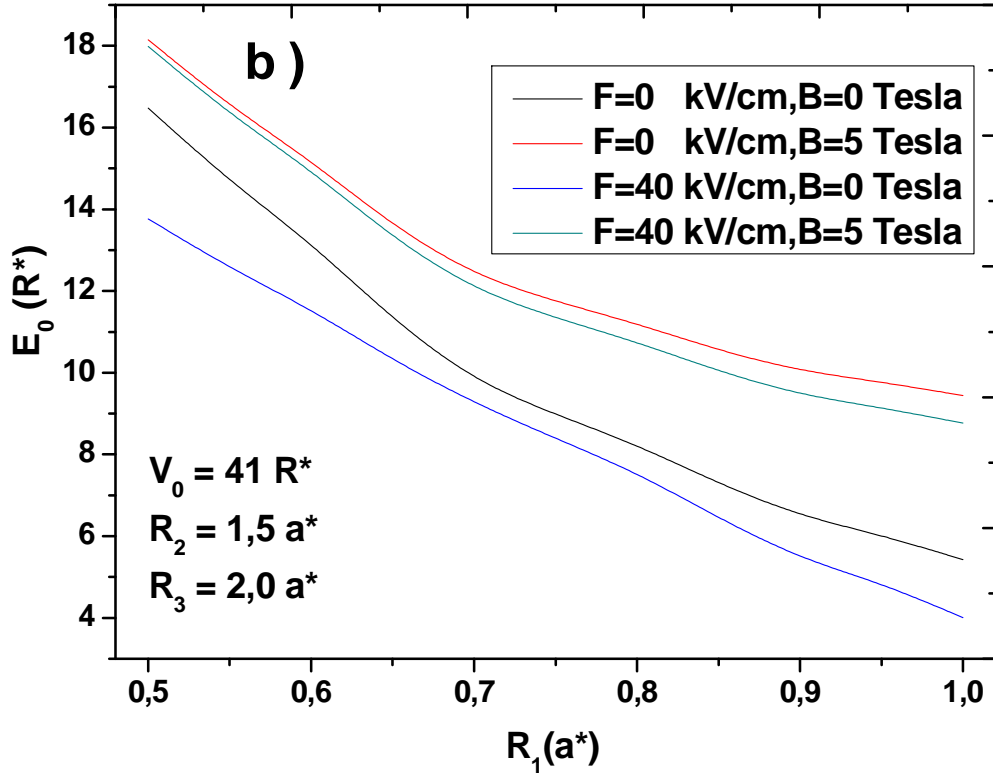
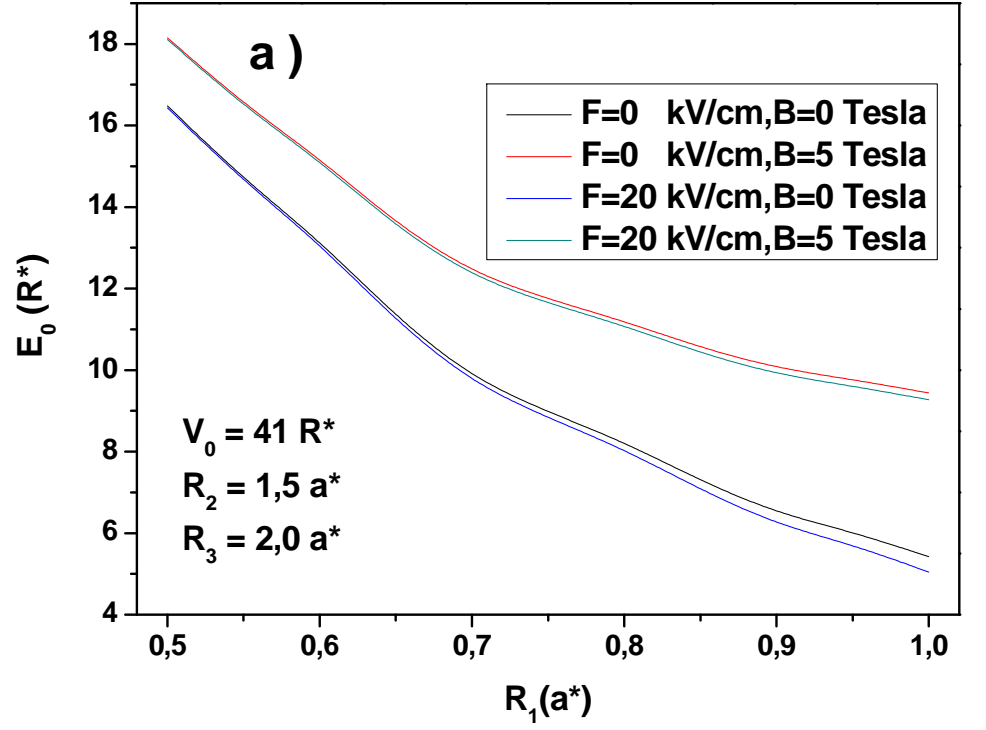
Şekil (4.1) : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=0kV/cm$, $B=0Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.



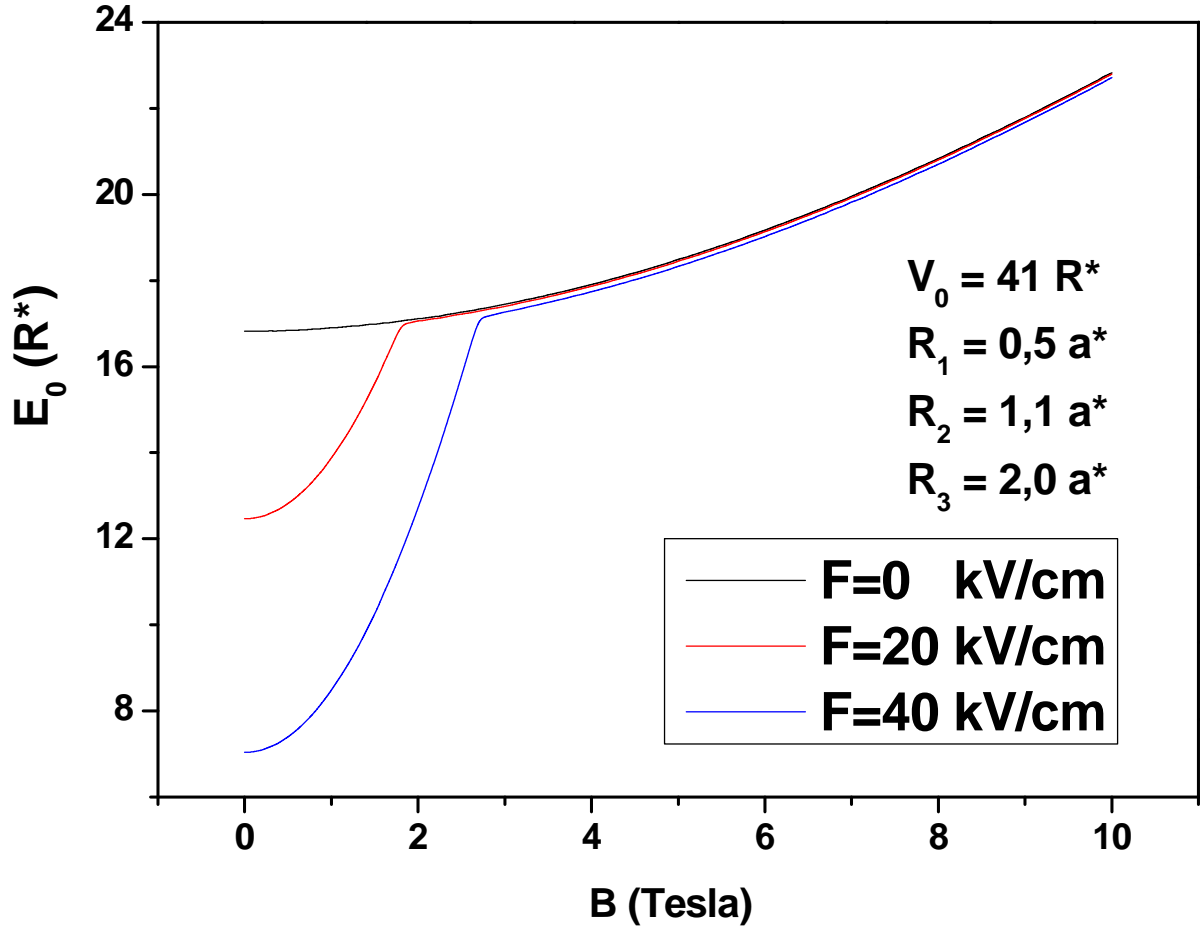
Şekil (4.2) : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=40\text{kV/cm}$, $B=0\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.



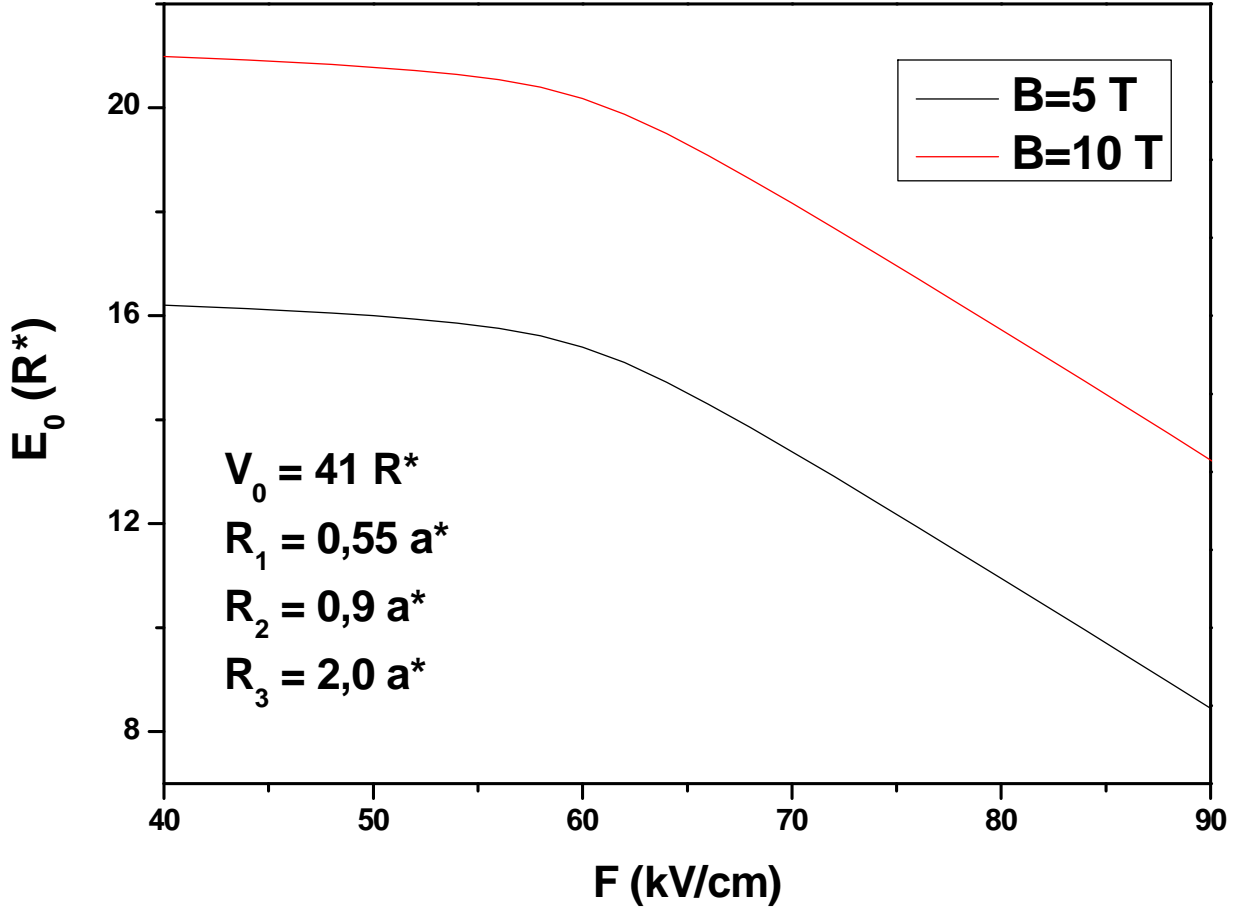
Şekil (4.3) : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=40\text{kV/cm}$, $B=5\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ değerleri için taban durumundaki elektronun dalga fonksiyonu.



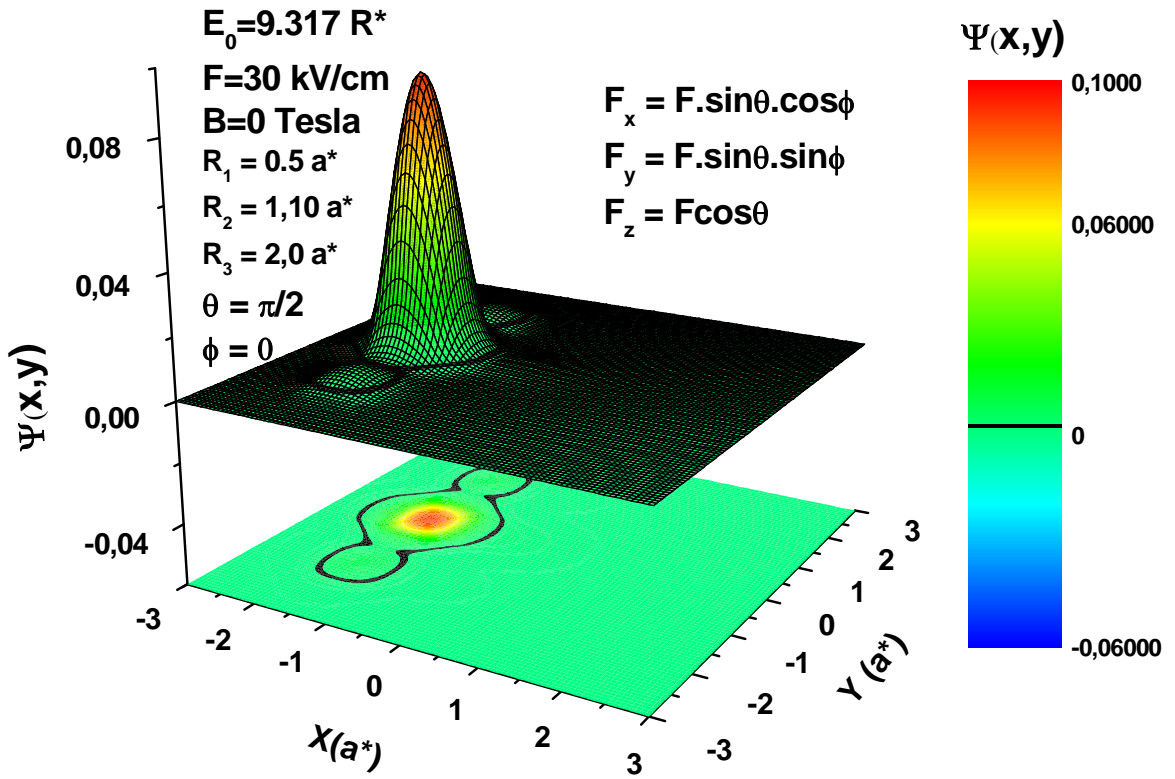
Şekil (4.4) : İç içe kübik kuantum noktasında, a) $F=0; 20kV/cm, B=0; 5Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_2=1.5a^*$, $R_3=2.0a^*$, b) $F=0; 40kV/cm, B=0; 5Tesla$, $V_0=41R^*$, $R_2=1.5a^*$, $R_3=2.0a^*$ değerlerinde R_1 ' e göre elektronun taban durumu enerji değişimleri.



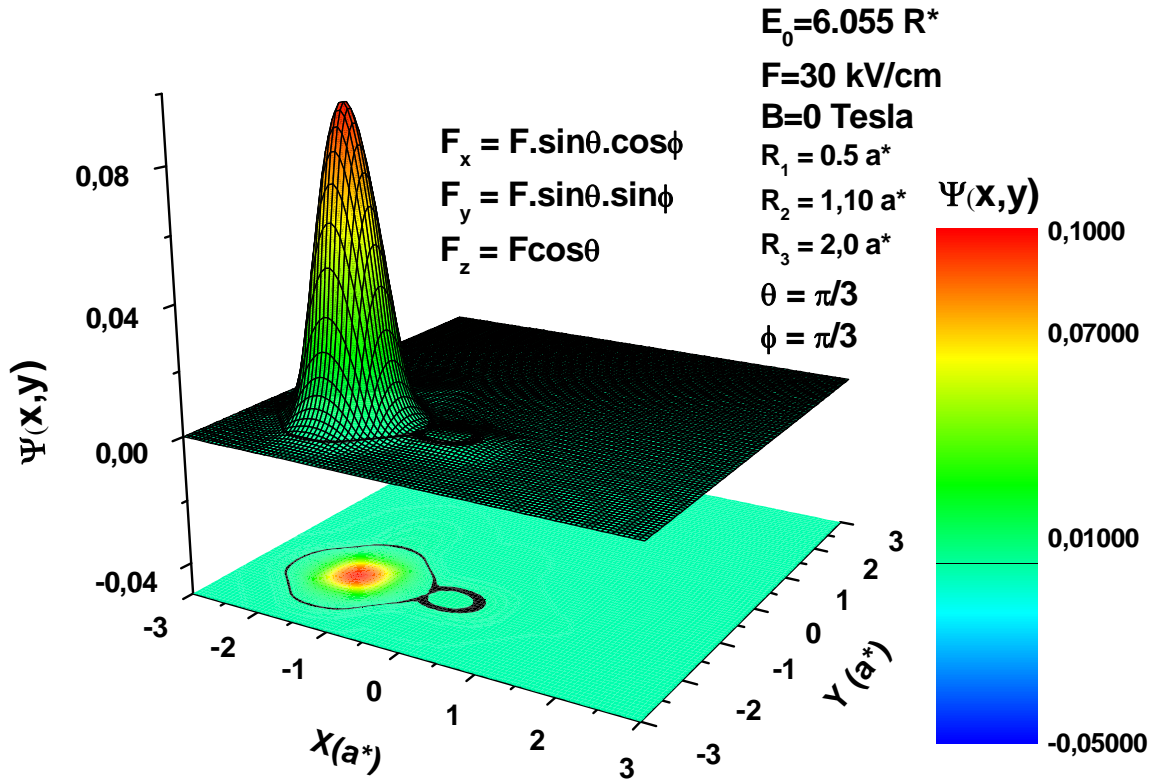
Şekil (4.5) : İç içe kübik kuantum noktasında, $F=0;20;40kV/cm$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.5a^*$, $R_2=1.1a^*$, $R_3=2.0a^*$ değerleri için elektronun taban durumu enerjisinin manyetik alana göre değişimi.



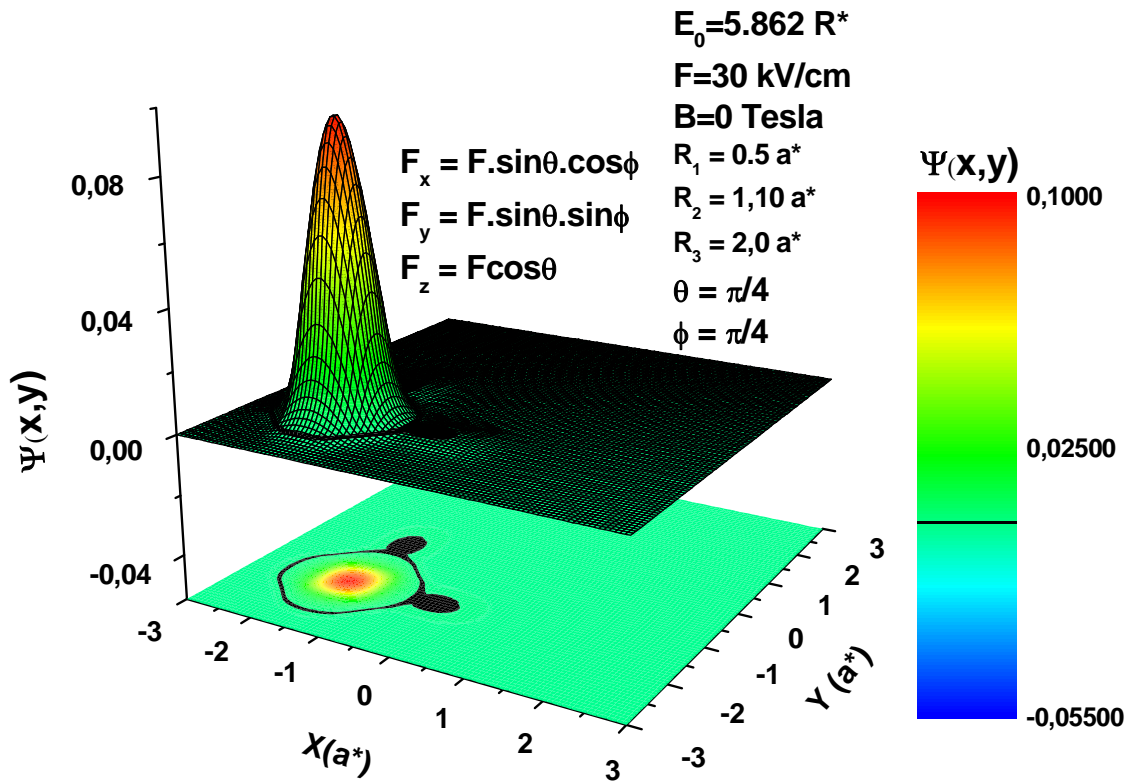
Şekil (4.6) : İç içe kübik kuantum noktasında, $B=5;10\text{Tesla}$, $V_0=41R^*$, $R_1=0.55a^*$, $R_2=0.9a^*$, $R_3=2.0a^*$ değerleri için elektronun taban durumu enerjisinin elektrik alana göre değişimi.



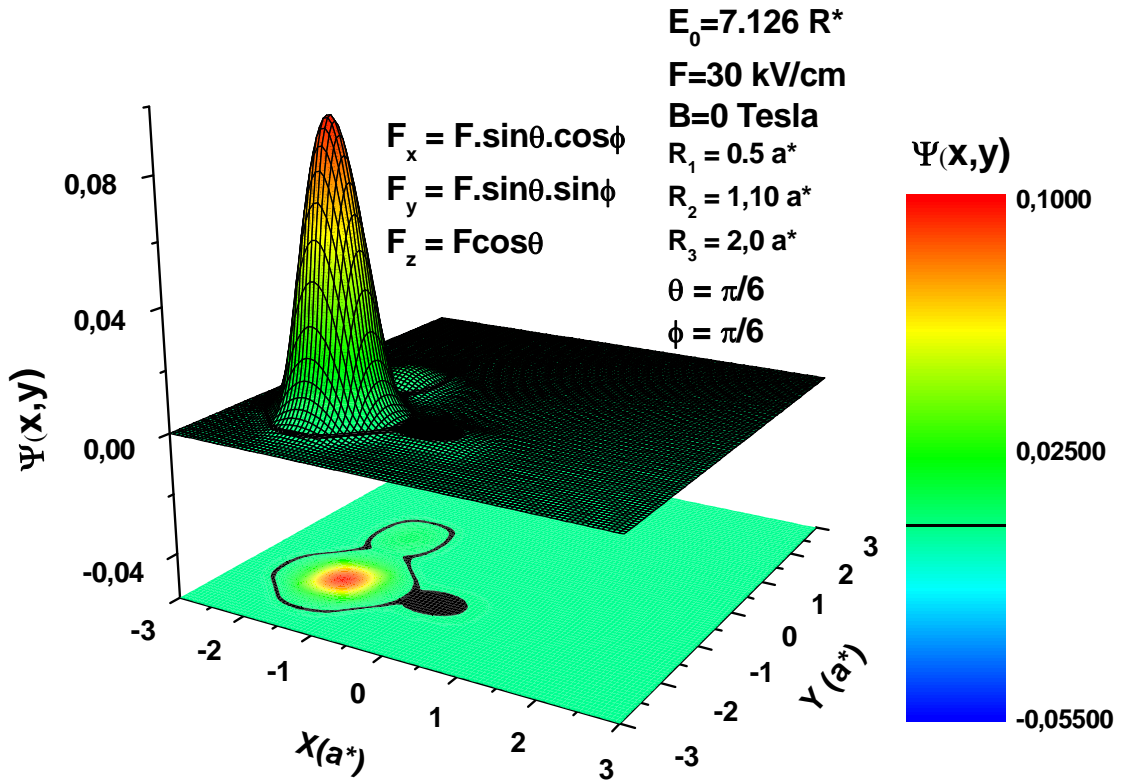
Şekil (4.7) : İç içe kübik kuantum noktasında, $B = 0 \text{ Tesla}$, $V_0 = 41 R^*$, $R_1 = 0.5 a^*$, $R_2 = 1.1 a^*$, $R_3 = 2.0 a^*$ değerlerinde ve $\theta = \pi/2$, $\phi = 0$ yönünde büyüklüğü $F = 30 \text{ kV/cm}$ 'lik elektrik alanın etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu.



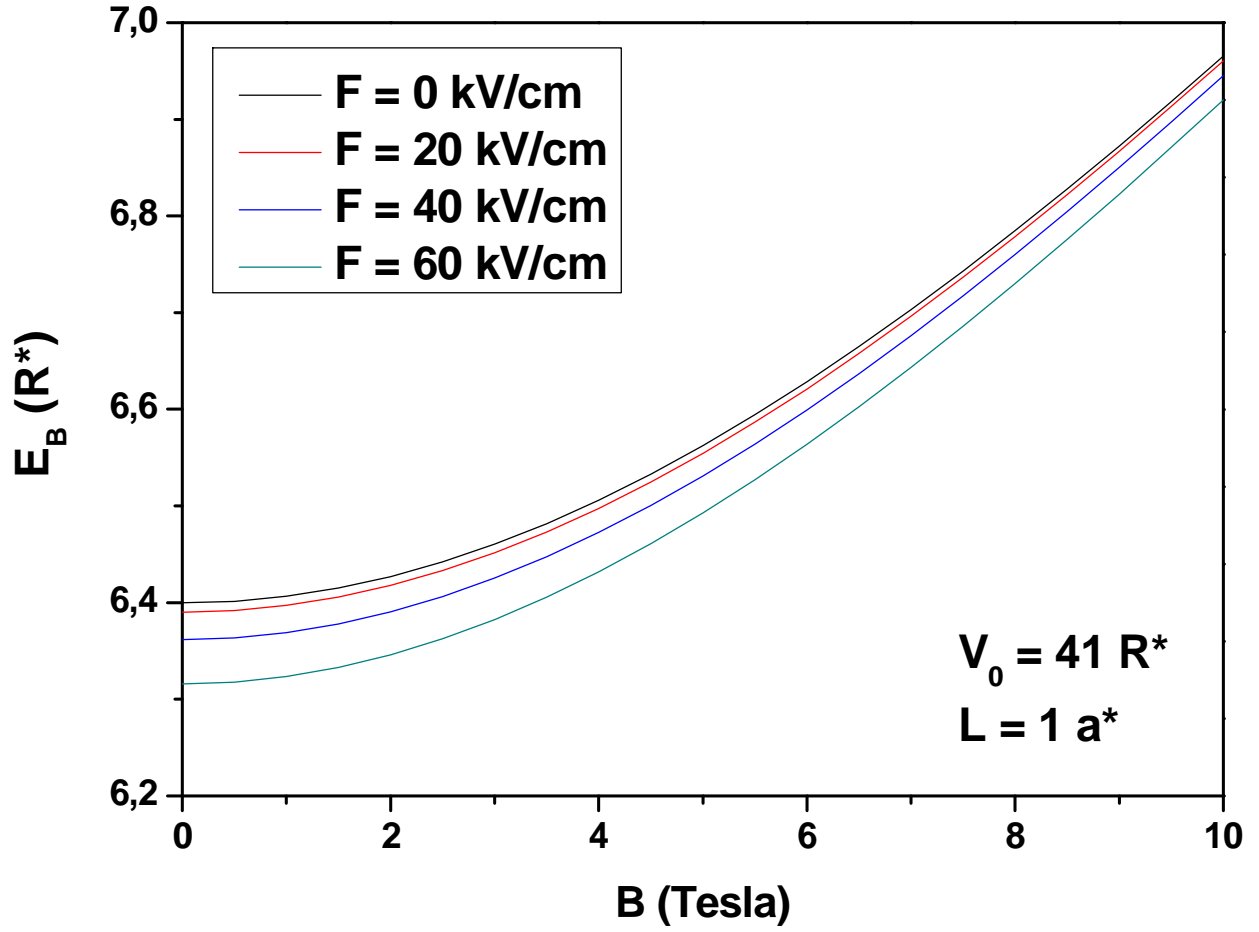
Şekil (4.8) : İç içe kübik kuantum noktasında, $B = 0 \text{ Tesla}$, $V_0 = 41R^*$, $R_1 = 0.5a^*$, $R_2 = 1.1a^*$, $R_3 = 2.0a^*$ değerlerinde ve $\theta = \pi/3$, $\phi = \pi/3$ yönünde büyüklüğü $F = 30 \text{ kV/cm}$ lik elektrik alan etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu.



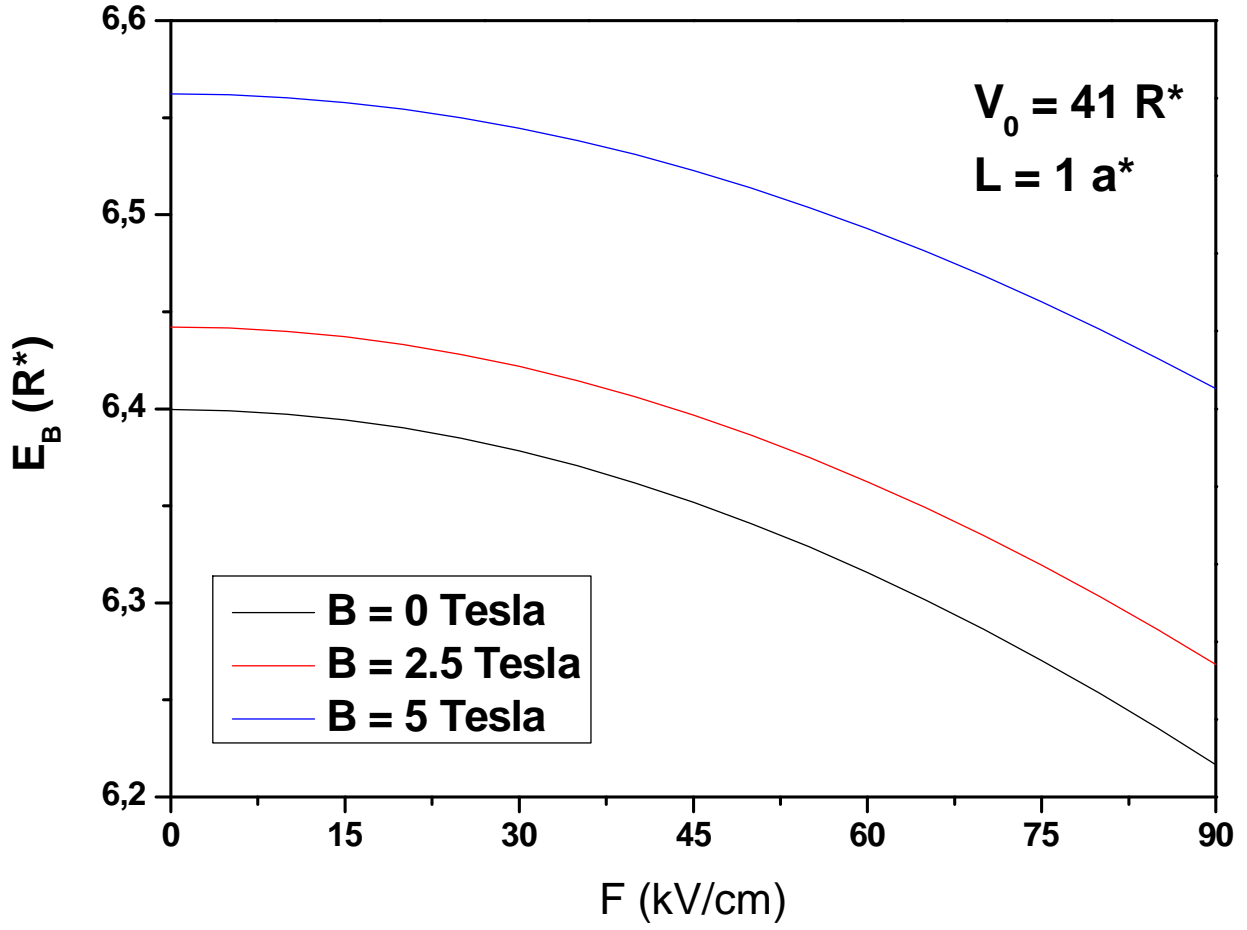
Şekil (4.9) : İç içe kübik kuantum noktasında, $B = 0 \text{ Tesla}$, $V_0 = 41R^*$, $R_1 = 0.5a^*$, $R_2 = 1.1a^*$, $R_3 = 2.0a^*$ değerlerinde ve $\theta = \pi/4$, $\phi = \pi/4$ yönünde büyüklüğü $F = 30 \text{ kV/cm}$ ’lik elektrik alanın etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu.



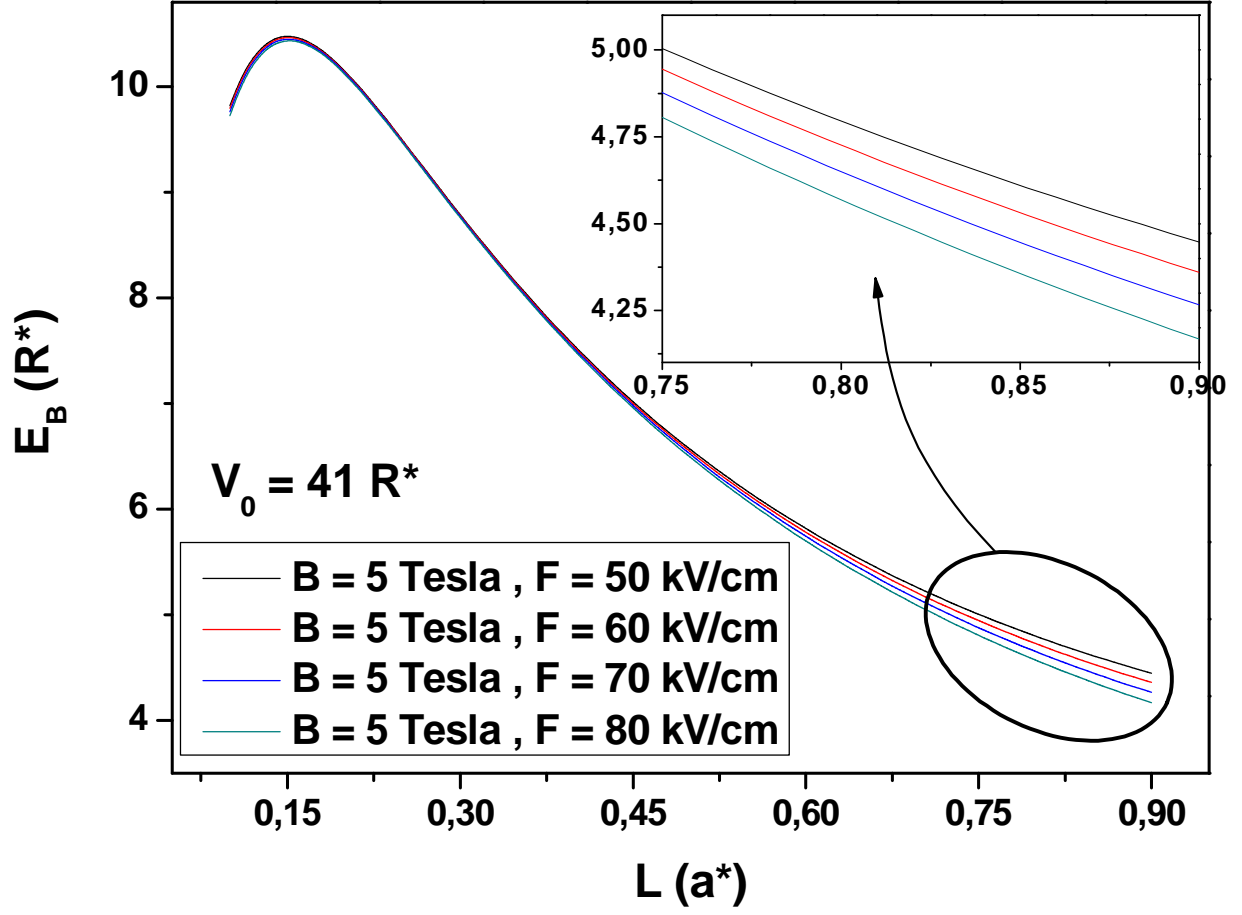
Şekil (4.10) : İç içe kübik kuantum noktasında, $B = 0 \text{ Tesla}$, $V_0 = 41R^*$, $R_1 = 0.5a^*$, $R_2 = 1.1a^*$, $R_3 = 2.0a^*$ değerlerinde ve $\theta = \pi/6$, $\phi = \pi/6$ yönünde büyüklüğü $F = 30 \text{ kV/cm}$ ' lik elektrik alan n etkisindeki elektronun taban durumundaki dalga fonksiyonu.



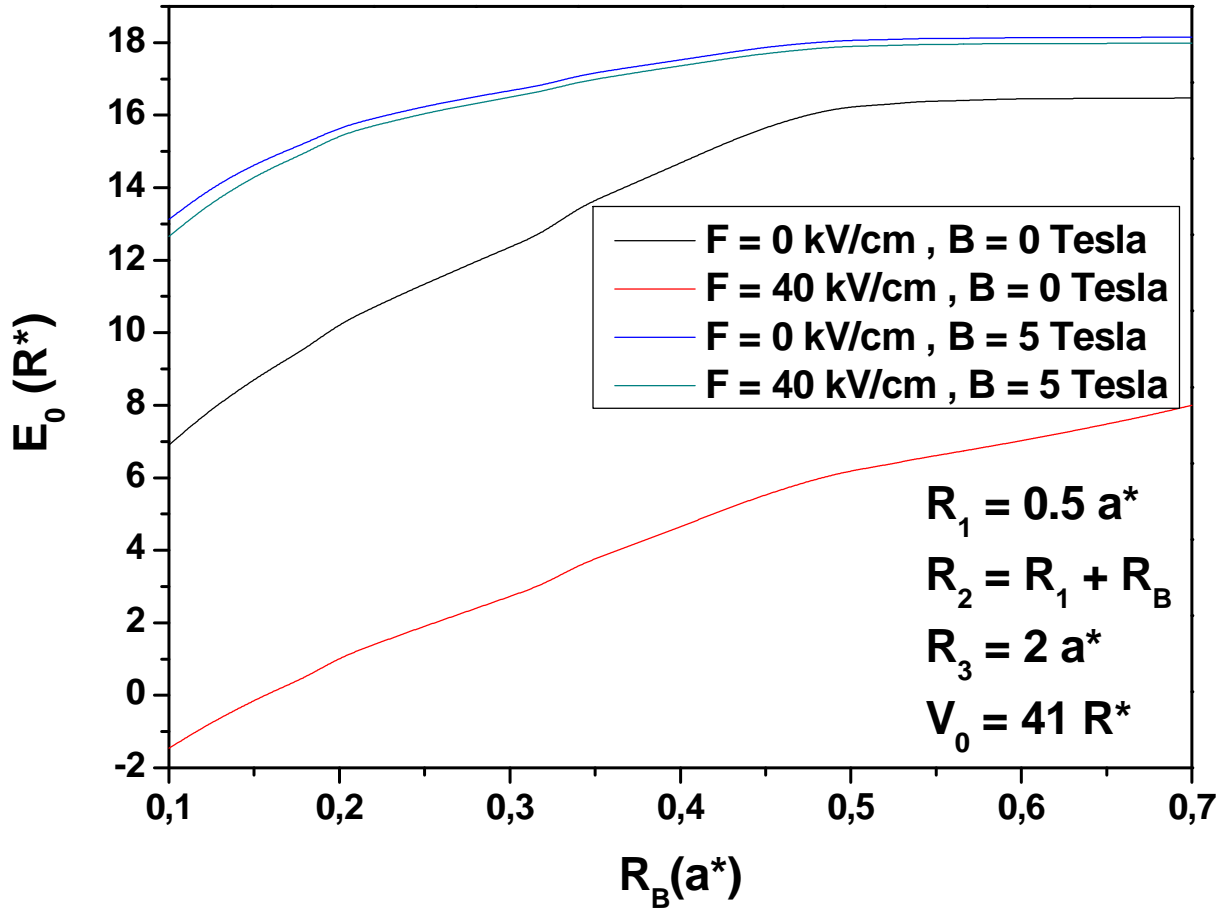
Şekil (4.11) : Kübik kuantum noktasının merkezdeki yabancı atom için, $L=1a^*$ ve $V_0=41R^*$ değerlerinde, $F=0;20;40;60kV/cm$ ' lik elektrik alan etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin manyetik alana şiddetine göre değişimi.



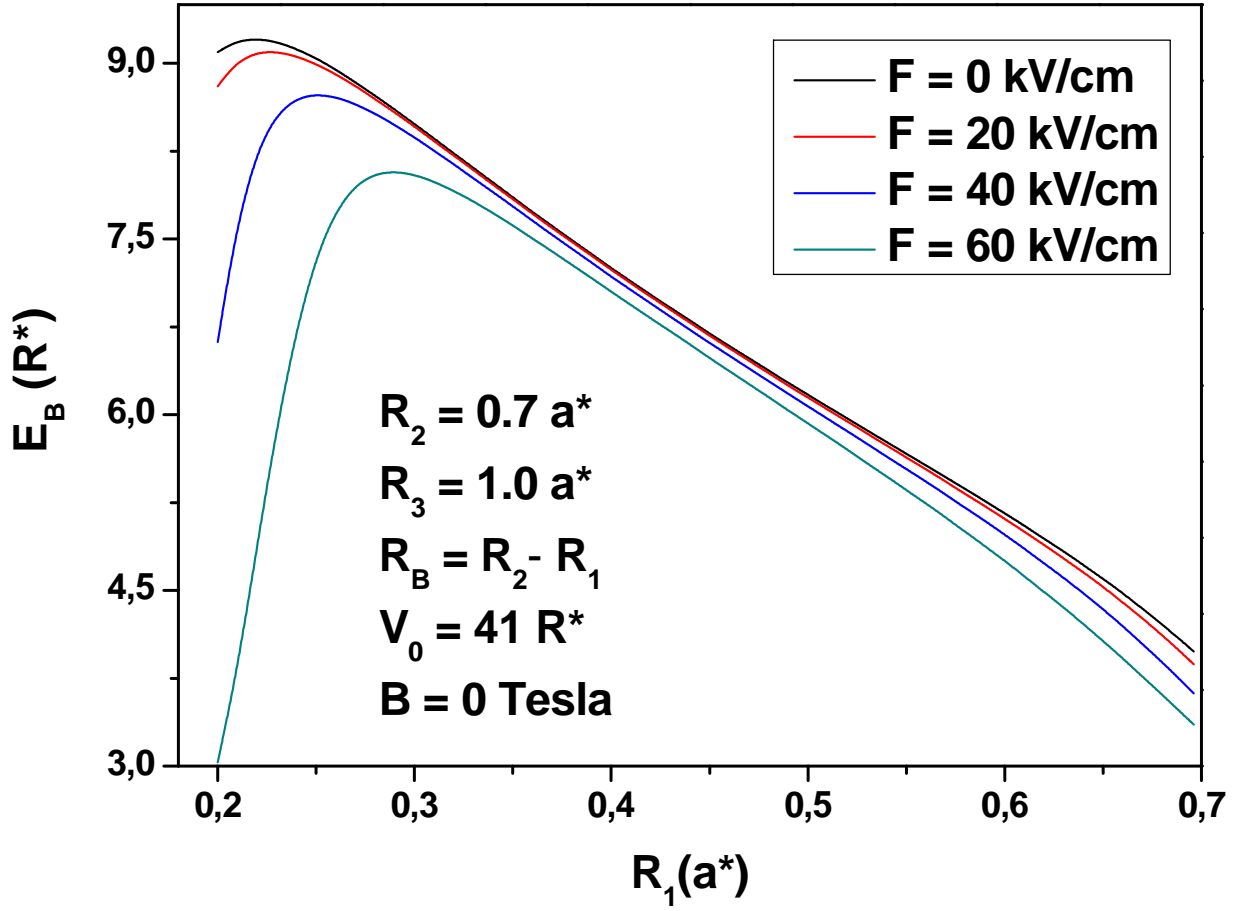
Şekil (4.12) : Kübik kuantum noktasının merkezdeki yabancı atom için, $L=1a^*$ ve $V_0=41R^*$ değerlerinde, $B=0;2.5;5Tesla$ ’ lik manyetik alan etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin elektrik alan şiddetine göre değişimi.



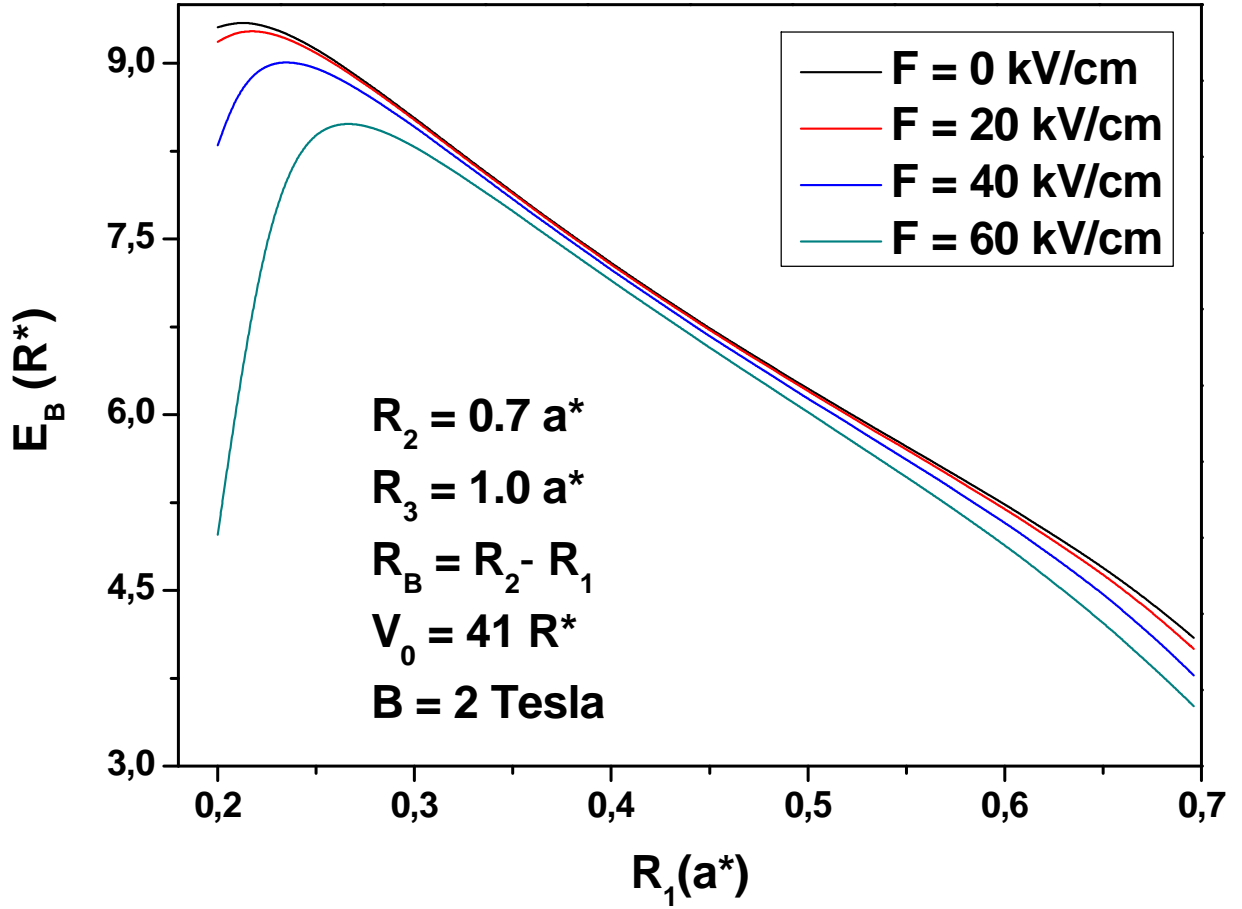
Şekil (4.13) : Kübik kuantum noktasının merkezdeki yabancı atom için, $V_0 = 41R^*$ ve $B = 5 \text{ Tesla}$ değerlerinde, $F = 50; 60; 70; 80 \text{ kV/cm}$ ' lik elektrik alan şiddeti etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin nokta genişliğine göre değişimi.



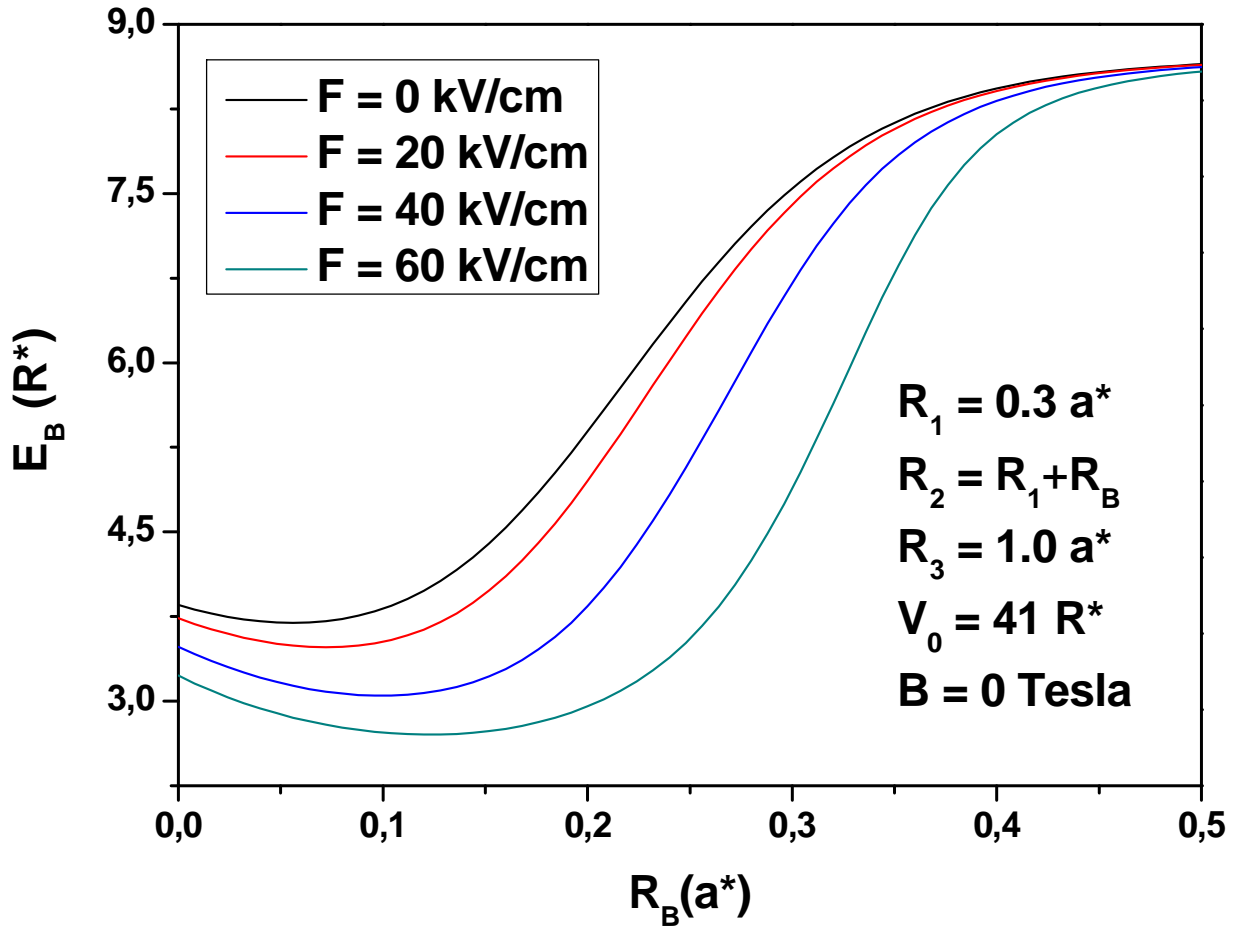
Şekil (4.14) : İç içe kübik kuantum noktasındaki bir elektronun, $V_0 = 41R^*$, $B = 0 - 5 \text{ Tesla}$ ve $F = 0; 40 \text{ kV/cm}$ ’ lik manyetik ve elektrik alan değerlerinde taban durumundaki enerjisinin bariyer genişliğine göre değişimi.



Şekil (4.15) : İç içe kübik kuantum noktasının merkezdeki yabancı atom için, $V_0 = 41R^*$ ve $B = 0 \text{ Tesla}$ değerlerinde, $F = 0; 20; 40; 60 \text{ kV/cm}$ ' lik elektrik alan şiddeti etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin nokta genişliğine göre değişimi.



Şekil (4.16) : İç içe kübik kuantum noktasının merkezdeki yabancı atom için, $V_0 = 41R^*$ ve $B = 2 \text{ Tesla}$ değerlerinde, $F = 0; 20; 40; 60 \text{ kV/cm}$ ' lik elektrik alan şiddeti etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin nokta genişliğine göre değişimi.



Şekil (4.17) : İç içe kübik kuantum noktasının merkezdeki yabancı atom için, $V_0 = 41R^*$ ve $B = 0 \text{ Tesla}$ değerlerinde, $F = 0; 20; 40; 60 \text{ kV/cm}$ ' lik elektrik alan şiddeti etkisindeki elektronun bağlanma enerjisinin bariyer genişliğine göre değişimi.

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada ilk aşamada farklı geometriye sahip kuantum kuyusunda hapsedilmiş bir elektronun elektrik ve manyetik alan altında taban durum enerjisi ve dalga fonksiyonu nümerik yöntem olan sonlu farklar yöntemiyle belirlendi. Daha sonraki aşamada yapıya yabancı atom eklenerek elektronun yabancı atoma bağlanma enerjisi hesaplandı.

İkinci aşamada kübik ve iç içe kübik kuantum noktası ele alındı. Hesaplamalarda etkin kütle yaklaşımı içinde sonlu farklar ve varyasyonel yöntem kullanılarak yapıldı. İlk önce sistemde yabancı atom yokken elektrik ve manyetik alan etkileri incelenmiştir. Elektrik alan x yönünde uygulanmış ve uygulanan elektrik alan kübik kuantum noktasının simetrisini bozmakta ve enerji değerleri azalmaktadır. x yönünde elektrik alan ile birlikte z yönünde manyetik alan da uygulanmıştır. Kübik kuantum noktasında taban durumundaki elektronun bağlanma enerjisi elektrik ve manyetik alan şiddetinin ve bariyer genişliğinin fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Burada elektrik ve manyetik alan arasında bir çekişme olmaktadır. Manyetik alan ile enerji değerleri artmış ve taban durum dalga fonksiyonunun bir kısmı içe doğru kaymaktadır. Buna karşılık elektrik alan, uygulandığı yönün tersine doğru yapıyı eğmekte ve elektronu bu yöne yönelterek enerjisini azaltmaktadır.

Bu çalışmada sonlu farklar yönteminin kullanılmasındaki amaç, bilgisayar dilinde yazımı kolay, hızlı ve güvenilir sonuç vermesidir. Bu yöntem, karmaşık diferansiyel denklemlerin çözümlerini yaklaşımlara götürmeden kısa yoldan nümerik yöntemle çözümlerini sağlar. Karşımıza çıkan diferansiyel denklemleri çözmek ve enerji düzeyleri ile dalga fonksiyonları bulmak ayrıca bunlara elektrik ve manyetik alan eklemek sonlu farklar yöntemi ile oldukça kolaydır. Bu yöntemle enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonları karmaşık işlemlere gitmeden kolayca bulunur. Sisteme yabancı atom, elektrik ve manyetik alan eklenerek varyasyon yöntemi ile yabancı atom etkisi hesaplanmıştır.

Bu çalışmada hesaplanan bütün sonuçlar literatür ile uyum içindedir.

KAYNAKLAR

- Aktas S. ve Boz F.K., *Physica E* 40,753(2008).
- Aktas S. ve Boz F.K., *Superlattices and Microstructure* 37,281(2005).
- Bela R.S.D. ve Navaneethakrishnan K., *Solid State Com.*130,773 (2004).
- Bilekkaya A., Aktas S., Okan S.E. ve Boz F.K., *Superlattices and Microstructure*, 44,1 (2008)
- Branis S. V. ,Li. G , Bajaj K. K. , *Phys cal Review B*, 47,1316(1993).
- Chuu D.S., Hsiao C.M., ve. Mei W. N., *Phys cal Review B*,46,7(1992).
- Hsieh Cheng-Ying, *Chinese Journal of Physics*, 38, 478(2000).
- Karaođlu B. , 1993-1994. “Kuantum Mekanikine Giriş” , Bilgitek yayıncılık, İstanbul.
- Kasapođlu E., Sari H., Sökmen I., *Chm.Physc.Lett.* ,21,12(2004)2500.
- Kittel C. ,1996. , “Katıhal Fizikine Giriş” (Bekir Karaođlu), 6. Basım, 224, Bilgitek yayıncılık. , İstanbul
- Masale M., Constantınou N. C.,Tıley D. R., *Phys cal Review B* ,46,15432(1992.)
- Montenegro N.P. ve Merchancancano S. T. P. , *Phys. Rev. B* 46,9780(1992).
- Niculescu E. C., *Czechoslovak Journal of Physics*.51, 1205, (2001).
- O.Akankan, S.E.Okan, H.Akbas, *Physica E* 25, 535-538 (2005).
- O.Akankan, S.E.Okan, H.Akbas, *Physica E* 35, 217-221 (2006).
- O.Akankan, S.E.Okan, H.Akbas, *Physica E* 36, 119-122 (2007).
- Ribeiro F. J., ve Latge A., *Physc. Rev. B* 50, 4913 (1994).
- Sucu S.,Mese A.İ, ve Okan S.E. , *Physica E*, 40,(2008).
- Zhu J.L., Xiong J. J., ve Gu B.L., *Phys. Rev. B* 41,6001,(1990).