

GaInNAs/GaAs KUANTUM KUYULARINDA
EKZİTONİK YAPININ YOĞUN LAZER ALANI
ALTINDAKİ DAVRANIŞI

ÜNAL YEŞİLGÜL

DOKTORA TEZİ
KATIHAL FİZİĞİ ANABİLİM DALI
2010

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GaInNAs/GaAs KUANTUM KUYULARINDA
EKZİTONİK YAPININ YOĞUN LAZER ALANI
ALTINDAKİ DAVRANIŞI

ÜNAL YEŞİLGÜL

DOKTORA TEZİ

KATIHAL FİZİĞİ ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI
PROF. DR. HÜSEYİN SARI

SİVAS
2010

Bu alıřma Cumhuriyet niversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanmıř ve jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda doktora tezi olarak kabul edilmiřtir.

Bařkan	Prof. Dr. Bilal TANATAR	_____
ye	Prof. Dr. İsmail SÖKMEN	_____
ye	Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ	_____
ye	Prof. Dr. Esin KASAPOĐLU	_____
ye (Danıřman)	Prof. Dr. Hüseyin SARI	_____

ONAY

Bu tez alıřması, 16/07/2010 tarihinde Enstitü Yönetim Kurulu tarafından belirlenen ve yukarıda imzaları bulunan jüri üyeleri tarafından kabul edilmiřtir.

Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Bu tez Cumhuriyet Üniversitesi Senatosu'nun 24.09.2008 tarihli ve 007 sayılı toplantısında kabul edilen Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzu adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

Çalışmam sırasında sevgi ve desteğini esirgemeyen aileme

ÖZET

GaInNAs/GaAs KUANTUM KUYULARINDA EKZİTONİK YAPININ YOĞUN LAZER ALANI ALTINDAKİ DAVRANIŞI

Ünal YEŞİLGÜL

Doktora Tezi, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2010, 153 sayfa

Bu çalışmanın ilk aşamasında külçe yarıiletkenler için **k.p** teorisi, etkin kütle yaklaşımı(zarf fonksiyonu yaklaşımı) ve sonlu elemanlar yöntemi (FEM) hakkında genel bilgiler verilmiştir. İkinci aşamasında, yarıiletken kuantum kuyularının bant yapısı çoklu bant etkin kütle yaklaşımı (**k.p** teorisi) ile tanımlanarak çiftlenimli bantların sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile nasıl çözüleceği üzerinde durulmuştur. Sonlu elemanlar yöntemi ile $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunun iletkenlik ve valans alt bant yapısı üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi hesaplanmıştır. Daha sonra $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunun potansiyel profilleri ve alt bant enerjileri üzerine yoğun lazer alanının etkisi incelenmiştir. Son olarak da, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunda taban durumdaki ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanı, farklı azot ve indiyum konsantrasyonları ile değişimi etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir.

Anahtar kelimeler: Kuantum kuyusu, çoklu bant etkin kütle teorisi (**k.p** teorisi), sonlu elemanlar yöntemi (FEM), ekziton, ekziton bağlanma enerjisi, yoğun lazer alanı

ABSTRACT

THE FEATURES OF THE EXCITONIC STRUCTURE IN GaInNAs/GaAs QUANTUM WELLS UNDER THE INTENSE LASER FIELD

Ünal YEŞİLGÜL

PhD Dissertation, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2010, 153 pages

In the first stage of this study, general information about the **k.p** theory for bulk semiconductors, effective mass approximation, and finite elements method (FEM) is presented. In the second stage, the band structure of semiconductor quantum wells are defined via multi band effective mass approximation (**k.p** theory) and the solution methods are discussed for degenerated bands by using the finite element method (FEM). The effects of nitrogen and indium concentration on the conduction and valence sub-band structure of the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well is calculated with the finite element method. Then, the effects of intense laser field on the potential profiles of the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs single quantum well and sub-band energies are investigated. Finally, the effects intense laser field, nitrogen and indium concentrations on the on the binding energy of the ground level exciton in $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well are investigated variationally by using effective mass approximation .

Key words: Quantum well, multi band effective mass approximation (**k.p** theory), finite element method (FEM), impurity binding energy, intense laser field

TEŞEKKÜR

Akademik hayatıma başladığım andan itibaren desteğini esirgemeyen ve bilimsel düşünme yetisi kazanmamı sağlayan danışman hocam Prof. Dr. Hüseyin SARI'ya teşekkür ederim.

Çalışmam boyunca bilgi ve deneyimleri ile yol gösteren fiziğe farklı açılardan bakmamı sağladığı ve gösterdiği sabırdan dolayı değerli hocam Prof. Dr. İsmail SÖKMEN'e sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarımın her aşamasında bilgi ve deneyimlerinden faydalandığım ve ilerde yapmayı planladığım çalışmalarım da her daim kullanacağım bu bilgiler için sevgili hocam Prof. Dr. Esin KASAPOĞLU'na müteşekkirim.

Ayrıca verdiği katkı ve desteklerden dolayı sevgili arkadaşım Arş. Gör. Fatih UNGAN başta olmak üzere tüm araştırma görevlisi arkadaşlarıma gönülden teşekkür ederim.

Bana her konuda sabırları ve sevgileri ile yardımcı olan sevgili eşim Betül YEŞİLGÜL ve kızım Bera YEŞİLGÜL'e ve ayrıca beni bu günlere getiren aileme desteklerinden dolayı teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
TEŞEKKÜR.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	x
TABLolar DİZİNİ.....	xii
1 GİRİŞ.....	1
2 KÜLÇE YARIİLETKENLER İÇİN k.p TEORİSİ	5
2.1 Kane Teorisi ve Luttinger-Kohn Modeli	12
2.2 Seyreltik III-N-V Yarıiletkenler.....	28
2.3 Bant Anti-Crossing (BAC) Yaklaşımı	29
2.4 III-N-V Külçe Yarıiletkenler için 6+4 bant k.p Teorisi.....	32
3 ZARF FONKSİYONU YAKLAŞIMI	38
3.1 İletim Bandı	40
3.2 Çiftlenimli Bantlar ve Zarf Dalga Fonksiyonu	42
3.3 III-N-V Yarıiletken Kuantum Kuyularının Bant Yapısı	47
4 SONLU ELEMENLAR YÖNTEMİ (FEM)	51
4.1 Baz Fonksiyonlarının Seçimi	55
4.2 FEM'in Çiftlenimli Bantlara Uygulanması	57
5 $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK BANDI YAPISI.....	69
6 $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ KUANTUM KUYUSUNUN VALANS BANDI YAPISI.....	76
7 YOĞUN LAZER ALANI (IFL) ALTINDA $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ KUANTUM KUYUSUNUN ELEKTRONİK YAPISI	81
7.1 Yüksek Frekans Yoğun Lazer Alanı Altındaki Bir Kuantum Kuyusundaki Elektron.	83
7.2 Yoğun Lazer Alanı Altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ Kuantum Kuyusunun Potansiyel Profilleri ve Altbant Enerjileri.....	86
8 YOĞUN LAZER ALANI ALTINDAKİ $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ KUANTUM KUYUSUNDA EKZİTONİK YAPI	96
9 SONUÇLAR	109
KAYNAKLAR.....	111

EKLER

EK-1 Kane Modeli İçin Elde Edilen Hamiltonian Matris Elemanlarının Bulunması	116
EK-2 Luttinger Modeli İçin Elde Edilen Hamiltonian Matris Elemanlarının Bulunması	131
EK-3 Etkin kütle yaklaşımı için gerekli ara işlemler.....	139
EK-4 Polinom İnterpolasyonu ve Lagrange Polinomlarının Elde Edilmesi	142
ÖZGEÇMİŞ.....	151

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	BAC modeli kullanarak GaInNAs şematik bant yapısı.....	31
Şekil 2.2	4 bant modeli kullanılarak elde edilen $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ külçe yapısının iletim bandı yapısı.....	34
Şekil 2.3	6 bant modeli kullanılarak elde edilen $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ külçe yapısının valans bandı yapısı.....	37
Şekil 3.1	Bir kare Kuantum Kuyusunun Şematik Gösterimi.....	38
Şekil 4.1	z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonları.....	56
Şekil 4.2	Çiftlenimli bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması...	60
Şekil 5.1	Farklı azot konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi....	73
Şekil 5.2	Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} /GaAs$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi....	74
Şekil 5.3	Farklı kuyu genişlikleri için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.....	75
Şekil 6.1	Farklı azot konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi...	78
Şekil 6.2	Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi...	79
Şekil 6.3	Farklı kuyu genişlikleri için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.....	80
Şekil 7.1	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun şematik gösterimi.....	86
Şekil 7.2	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel potansiyel profili, iletim alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarını karesi (a) $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$	91
Şekil 7.3	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel potansiyel profili, iletim alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarını karesi (a) $\alpha_0 = 100 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$	92
Şekil 7.4	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel potansiyel profili, valans alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarını karesi (a) $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$	93
Şekil 7.5	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel potansiyel profili, valans alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarını karesi (a) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$	94
Şekil 7.6	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun iletim ve valans bant enerjilerinin lazer alanına göre değişimi	95
Şekil 8.1	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun şematik gösterimi.....	96
Şekil 8.2	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunda farklı azot konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.....	102
Şekil 8.3	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunda farklı indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.....	104
Şekil 8.4	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun farklı azot konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi	106
Şekil 8.5	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun farklı indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi	107

Şekil 8.6 GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun farklı yoğun lazer alanları için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi 108

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 2.1	Atomik Bloch Saviyeleri.....	13
Tablo 2.2	Kane Hamiltoniyeni.....	14
Tablo 2.3	$\tilde{W} - W$ matris temsili	23
Tablo 2.4	W matris temsili	24
Tablo 2.5	$H(k = 0)$ matris temsili	25
Tablo 2.6	Luttinger-Kohn Hamiltoniyenin matris temsili.....	27
Tablo 2.7	Atomik Bloch Saviyeleri.....	32
Tablo 2.8	Atomik Bloch Saviyeleri.....	35
Tablo 2.9	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ valans bant matris temsili.....	36
Tablo 2.10	Bant yapısı hesaplamalarında kullanılan ikili bileşikler için parametreler	36
Tablo 5.1	Hesaplamalarda kullanılan GaAs, InGa, GaN, InN materyal parametreleri	70
Tablo 5.2	Hesaplamalarda kullanılan bükülme (Bowing) parametreleri (eV)	71

1. Giriş

Yarıiletken malzemeler 1940'lardan beri araştırılmakta ve bu araştırmalar sonucunda geliştirilen elektronik devre elemanları günlük hayatımızın birçok alanında kullanılmaktadır. Yarıiletkenlerin devre elemanı olarak kullanılması, elektronik teknolojisinin hızlı gelişmesini sağlamış ve katıhal fiziği üzerine yapılan çalışmaların artmasına neden olmuştur. Yarıiletkenlerin sıkça tercih edilmesinin temel nedenleri, çeşitli özelliklerdeki yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olması, yarıiletken materyallerin elektriksel ve optik özelliklerinin dış etkilerle değiştirilebilir olması ve istenilen özelliklerde bir devre elemanı yapılmasına imkân vermesidir. Tasarlanan yeni elektronik devre elemanlarının modellenmesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır.

Yarıiletkenlerin kristal yapılarının incelenmesi sayesinde yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri belirlenebilmektedir. Bu nedenle bilim adamları çalışmalarını yapay modeller üzerinde yoğunlaştırmışlardır. Bu çalışmalar 1970'lerin ortasından itibaren IBM' de çalışan Esaki ve Tsu önderliğinde güç kazanmıştır [1]. MBE (Molecular Beam Epitaxy) gibi büyütme teknikleri yarıiletken fiziği ve teknolojisinde önemli etkiler yapmıştır. Epitaksiyel olarak yapılan büyütme yöntemleri ile son derece değişik yapılar oluşturulabilmektedir. Örneğin, iki $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletken tabakası arasında GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik tekrarlanması halinde çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulabilen süper örgüler, bu yöntemlerle kolayca elde edilebilmektedir.

Yapılan çalışmalarda önce yük taşıyıcılarının bir yöndeki hareketleri kısıtlanarak iki-boyutlu kuantum kuyusu yapıları geliştirilmiştir. Daha sonra ise kuşatılma boyutları artırılarak bir boyutlu kuantum telleri ve sıfır-boyutlu kuantum kutuları yapılmıştır. Geliştirilen sistemlerde boyut azaldıkça yani kuşatma arttıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler ayarlanabilir duruma gelmektedir. Bu sayede özel fonksiyonlara sahip aletler tasarlanmaktadır.

Yukarıda adı geçen düşük boyutlu sistemlerin külçe yapılara göre üstünlüğü, bu sistemlerdeki boyut farklılığından kaynaklanır. Düşük boyutlu sistemlerde son derece dar ve iyi tanımlanmış enerji düzeylerini elde etmek mümkündür. Buna ek

olarak bu sistemlerde elektron (veya boşluk) yoğunluğu istenildiği gibi değiştirilebilir.

Kuantum kuyuları bir boyutta kuşatılmış olan yapılardır ve bu yapılar farklı malzemeler ile lazer diyotlar gibi yeni optik aletlerin yapımında kullanılır. Kuantum kuyularının valans bandı enerji band dağılımının ve dalga fonksiyonlarının hesaplanması genellikle çok karmaşıktır ve analitik çözümleri tam olarak yapılamamaktadır. Son zamanlarda düşük boyutlu sistemlerin analizi için birkaç nümerik teknik geliştirildi. Bunlar efektif bağ yörünge metodu(effective bond orbital method)(EBOM)[2], sıkı bağ metodu (tight binding method) (TBM)[3], sonlu farklar metodu(finite difference method)(FDM)[4] ve sonlu elemanlar metodu (finite element method) (FEM)[5, 6] dır.

EBOM ve TBM ile elektronik bant yapısı iyi bir doğrulukta hesaplanabilmesine karşın her bir atomik durum için 18'den fazla baz fonksiyonuna ve sonuçların elde edilmesi için oldukça büyük hafızalı bilgisayar ile çok uzun işlem zamanlarına ihtiyaç vardır[2, 3]. Bununla birlikte, FEM ve FDM için spin yörünge (spin -orbit) bandının ihmal edilip edilmemesine bağlı olarak sadece dört veya altı baz fonksiyonuna ihtiyaç vardır. FEM'in avantajı, FDM'ın üzerinde bir nümerik teknik olması ve eşit olmayan elementleri kullanılabilmesidir. Bu yüzden keyfi biçimli geometrilerin dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerinin analizi doğru olarak yapılabilir [5]. Nakamura ve ark., [7] keyfi potansiyel biçimli kuantum kuyuları için elektronların enerji düzeylerini FEM ile hesapladı. Yi ve Dagli [8] dört band $\vec{k} \cdot \vec{p}$ analizini FEM ile kullanarak benzer kuantum teli örneklerinin optik özellikleri ve valans band yapısını araştırdı.

III-V grubu yarıiletkenlerin belirli oranlarda katılarak alaşım halinde tabakalar biçiminde büyütülmesi ile elde edilen düşük boyutlu heteroyapılar optik haberleşme sistemlerinde olduğu kadar günümüzde birçok alanda sıkça kullanılan opto-elektronik devre elemanları için de oldukça stratejik bir öneme sahiptirler. Heteroyapıların elektronik ve optik özelliklerinin amaca uygun olarak ayarlanabilirliklerinin sınırlı olması, araştırmacıların yeni arayışlar içinde olmasını zorunlu kılmaktadır. Bu arayışlara örnek olarak lazer modellemesi ve yapımı konusunda yapılan çalışmalar verilebilir. GaAs tabanlı geleneksel heteroyapıların yasak bant aralığı 1200 nm den büyük dalga boyunda ışıyan cihazların yapımında kullanılmaları uygun değildir. Yine çok yaygın olarak kullanılan InP tabanlı

yapılarda 2100 nm'ye kadar ulaşılabilir. Bu nedenle, direkt bant aralığı 0.7 eV tan 3.2 eV a kadar geniş bir bant aralığında değiştirilebilen seyreltik azotlu GaInNAs heteroyapılar son yıllarda araştırmacıların önemle üzerinde durdukları yapılardır. Ayrıca, son yıllarda veri kaybının az ve optik kazancın fazla olduğu lazer sistemlerinin oluşturulması konusunda yoğun çalışmalar yapılmıştır. Yapılan bu çalışmalarda GaInNAs yapıların optik haberleşme sistemlerinde veri kaybının minimum olduğu 1300 nm-1700 nm penceresinde çalışabilecek lazer sistemlerinin yapılmasına olanak sağladıkları görülmüştür [9-11]. Bu pencerede ışılan lazerlerle optik haberleşme alanında mevcut sistemlere göre kapasite ve iletişim hızında önemli artışlar sağlanmaktadır. Ayrıca, GaAs alt taşlar üzerine büyütülen GaInNAs yapılarda iletim bandı süreksizliğine bağlı elektron kuşatma potansiyelinin yeterli yükseklikte olması bu yapıların uzun dalga boyu lazerlerin yapımında önemini arttırmıştır [12]. n- ve p-tipi katkılamada geliştirilen kontrol teknikleri sonucunda azot tabanlı p-n eklemleri üretilmiş ve buna paralel olarak heteroyapı LED'ler ve lazerler geliştirilmiştir [13-17]. Özellikle seyreltik azotlu yarıiletkenlerin kullanıldığı yapılarda oldukça önemli gelişmeler sağlanmıştır. III-V grubu yarıiletkenlere azot katılmasıyla fiziksel büyüklüklerin (yasak enerji bant aralığı, atomik örgü sabiti, taşıyıcı etkin kütle, kuşatma potansiyelinin biçimi gibi) ayarlanabilirlik sınırının önemli oranda değiştiği gözlenmiştir [13-21]. Kim ve arkadaşları tarafından MOVPE tekniği ile büyütülen çok bariyerli GaInNAs kuantum kuyusunun 1300 nm diliminde oldukça yüksek optik performansı kaydedilmiştir [19]. Bu çalışmada elde edilen yapı analizi sonuçlarına göre, InGaAs tabakası kuyu içinde azot'un yeniden dağılımını sağlar ve böylece keskin yüzeyli yapının oluşumu gerçekleşir. Ayrıca cihaz tasarımı kapsamında yapılan çalışmalarda optik pompalamalı aktif bölgenin iyileştirilmesi konusunda da önemli gelişmeler sağlanmıştır [22-24]. Bu gelişmelere paralel olarak, oldukça geniş operasyon dalga boyu aralığını kapsayan veri depolama, iletişim, güneş pilleri, foto dinamik terapi, gaz sensörleri ve terahertz cihazlar gibi yeni bir çok optoelektronik cihazın geliştirilmesi beklenmektedir. Uygulama alanında çok yaygın kullanılma potansiyeline sahip seyreltik azotlu yarıiletken yapıların daha kolay ve ekonomik büyütülebilmelerinin yanında özellikle lazerlerde elde edilen performansları da göz önüne alındığında, GaInNAs tabanlı yapıların optik haberleşme sistemlerinde kullanılan geleneksel InP tabanlı yapıların yerini almaları kaçınılmazdır.

Bu tez çalışmasında, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özellikleri çoklu bant etkin kütle yaklaşımı **k.p** teorisi çerçevesinde sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile incelendi ve kuantum kuyusundaki yük taşıyıcıların yoğun lazer alanı altındaki davranışları ve bu taşıyıcıların birbirleriyle yaptıkları Coulombic etkileşim sonucu oluşan ekzitonlar incelendi.

Bölüm 2’de külçe yarıiletkenler için **k.p** teorisi hakkında genel bir bilgi verilmiştir.

Bölüm 3’de etkin kütle yaklaşımı (zarf fonksiyonu yaklaşımı) özet olarak verilmiştir.

Bölüm 4’de sonlu elemanlar yöntemi (FEM) hakkında genel bilgiler verilerek, çiftlenimli ve çiftlenimsiz bantlara bu yöntemin uygulanabilmesi için gerekli analitik işlemler yapılmıştır.

Bölüm 5’de $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusunun iletkenlik bandı sonlu elemanlar yöntemi ile hesaplandı.

Bölüm 6’da $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusunun valans bandı sonlu elemanlar yöntemi ile hesaplandı.

Bölüm 7’de $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusundaki yük taşıyıcılarını yoğun lazer alanındaki davranışı incelendi.

Bölüm 8’de yoğun lazer alanı altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusundaki ekzitonlar incelendi.

Bölüm 9’da ise, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özellikleri açıklanmıştır. Elde edilen sonuçların teknolojiye ve aygıt tasarımına getireceği katkılar üzerinde tartışılmıştır.

2. KÜLÇE YARIİLETKENLER İÇİN k.p TEORİSİ

Bu bölümde, literatürde etkin kütle teorisi olarak isimlendirilen **k.p** teorisini inceleyeceğiz. **k.p** teorisi hem 3 boyutlu yarıiletkenler hem de kuantum kuyusu, teli ve kutusu gibi düşük boyutlu sistemleri tanımlamak için kullanılan bant yapısı modellerinden en yaygın olarak kullanılanlardan bir tanesidir. Bu yöntem bant kenarı yakınlarında oldukça doğru sonuçlar verir. **k.p** metodu ilk önce bant kenarında bilinen bant yapısı ile başlar ve daha sonra pertürbasyon teoremi kullanılarak yüksek simetri noktalarından uzaktaki bantların elde edilmesine çalışılır. Periyodik bir örgüde hareket eden, serbest bir parçacığı tanımlayan Schrödinger dalga denklemi,

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})) \cdot \vec{p} + \delta H_r \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.1)$$

ile verilir. Bu denklemdeki $V(\vec{r})$, iletkenlik elektronları ve iyonların neden olduğu etkin periyodik potansiyeldir ve aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \quad (2.2)$$

Burada $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ örgü öteleme vektörüdür. Denklem (2.1)'deki üçüncü terim $\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r)] \cdot \vec{p}$ spin-yörünge etkileşimini anlatan terimdir. Burada $\vec{\sigma}$, Pauli spin matrisleridir ve aşağıdaki bileşenlerle verilirler.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Sırası ile yukarı ve aşağı spin operatörleri de

$$\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

biçiminde verilir ve Pauli spin matrisleri spin durumlarına etki ettiklerinde

$$\begin{aligned}
\sigma_x \uparrow = \downarrow & \quad \sigma_y \uparrow = i \downarrow & \quad \sigma_z \uparrow = \uparrow \\
\sigma_x \downarrow = \uparrow & \quad \sigma_y \downarrow = -i \uparrow & \quad \sigma_z \downarrow = -\uparrow
\end{aligned} \tag{2.3}$$

durumları elde edilir. Denklem (2.1)'deki son terim $\delta H(r)$ ise relativistik etkileşimleri göstermektedir. Çoğu durumda bu relativistik etkileşimler oldukça küçüktür. Bu nedenle diğer terimler yanında ihmal edilir.

$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{R}$ dönüşümü altında Hamiltoniyen invaryant ve $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ denklem (2.1)'i sağlar.

Denklem (2.1)'in genel çözümü (Bloch Fonksiyonu)

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.4}$$

biçimindedir. Bloch teoremine göre;

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.5}$$

ve n. banttaki \vec{k} dalga vektörlü elektronun enerjisi $E = E_n(\vec{k})$ ile verilir.

n. banttaki \vec{k} dalga vektörlü elektron için Schrödinger denklemi

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r)) \cdot \vec{p} \right] \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.6}$$

dir. Burada denklem (2.4) ve ayrıca $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ olduğu kullanılırsa,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})) \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

$$\left[H_0 + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})) \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$$H_0 \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r)) \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

eşitliği elde edilir. İlk önce $H_0 \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right]$ kısmını hesaplayalım.

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla \left[\nabla \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla \left[\left(i\vec{k} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\nabla \left(\left(i\vec{k} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(i\vec{k} \right)^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \left(i\vec{k} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \left(i\vec{k} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-k^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + 2 \left(i\vec{k} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
H_0 \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[-k^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + 2 \left(i\vec{k} \right) \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right]
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Şimdi de $\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r)) \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right]$ kısmını hesaplayalım.

$$\begin{aligned}
& (-i\hbar) \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{\nabla} \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& (-i\hbar) (i\vec{k}) \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + (-i\hbar) \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\nabla} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& (-i\hbar) (i\vec{k}) \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + (-i\hbar) \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\nabla} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{k} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot (-i\hbar) \vec{\nabla} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{k} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{p} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right]
\end{aligned}$$

$$(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) = \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) = (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}$$

$$\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r)) \cdot (-i\hbar\vec{\nabla}) \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left[\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{k}) \cdot \vec{\sigma} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \quad (2.8)$$

Denklem (2.7) ve (2.8)'i birleştirecek,

$$\begin{aligned} H_0 \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r)) \cdot (-i\hbar\vec{\nabla}) \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] &= E_{n\vec{k}}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left[-k^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + 2(i\vec{k}) \cdot \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\ + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left[\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{k}) \cdot \vec{\sigma} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] &= E_{n\vec{k}}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} 2(i\vec{k}) \cdot \vec{\nabla} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{k}) \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= E_{n\vec{k}}(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= E_{n\vec{k}}(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

sonucuna ulaşırız. Denklem (2.9)'un sol tarafındaki son terim \vec{k} ya bağlı spin-yörünge etkileşimi terimidir. Bu terim diğerlerinin yanında oldukça küçüktür. Çünkü spin-yörünge etkileşiminin büyük kısmının oluştuğu atomun içlerinde kristal momentumu $\hbar\vec{k}$ atomun momentumu \vec{p} yanında oldukça küçüktür. Dolayısıyla denklem (2.9)

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.10)$$

olarak göz önüne alınabilir.

Denklem (2.10) \vec{k} ya bağlı ve \vec{k} bağılı olmayan iki kısma ayırabiliriz.

$$\left[H(\vec{k} = 0) + W(\vec{k}) \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.11)$$

Burada; $H(\vec{k}=0)$ ve $W(\vec{k})$ terimleri

$$H(\vec{k}=0) = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{p}$$

$$W(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$$

biçimindedir. Yerel tek parçacık Hamiltoniyeninin $H(\vec{k}=0)$, U_{n0} öz fonksiyonlarının ortogonal bir tam setine sahip olduğunu varsayalım.

$$H(\vec{k}=0)U_{n0}(\vec{r}) = \varepsilon_n(0)U_{n0}(\vec{r}) \quad (2.12)$$

Periyodik bir örgü fonksiyonunu U_{n0} özfonksiyonları cinsinden seriye açabiliriz.

Denklem (2.11) 'rin $E_{n\vec{k}}(\vec{k})$ öz değerine karşılık gelen özfonksiyonları,

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_m c_m^n(\vec{k}) U_{m0}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

seri açılımı şeklinde yazabiliriz. Seri açılımdaki $c_m^n(\vec{k})$ bilinmeyen sabitleri belirlemek için matris denklemini bulabiliriz. Bu matris denklemini elde etmek için soldan U_{n0}^* ile

çarpıp, integral ve baz fonksiyonlarının $\int_{\text{hücre}} U_{n0}^*(\vec{r}) U_{m0}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{nm}$ diklik özelliğini

kullanırız. Bu işlemlerin sonucunda,

$$\sum_m \left[(\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{n\vec{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}) \delta_{nm} + \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} \langle U_{n0} | \vec{p} | U_{m0} \rangle \right] c_m^n(\vec{k}) = 0 \quad (2.14)$$

denklemini elde ederiz. Burada $H(\vec{k}=0)U_{n0}(\vec{r}) = \varepsilon_n(0)U_{n0}(\vec{r})$ ifadesini kullandık.

Denklem (2.14)'deki matris denkleminin çözümü denklem (2.10)'da ifade edilen dalga denkleminin tam özfonksiyonlarını verir. Bununla beraber k 'nın artışı hesaplamalardaki karmaşıklık artırır. Bu karmaşıklığın ilki denk (2.13)'deki seri açılımındaki durumların sayısını artırır ve hesaplamaları nümerik olarak elde edilemez hale getirir. Bu nedenle genellikle bu yaklaşım sadece küçük k dalga vektörü değerleri için pratiktir. Denk (2.14) ifadesinde kübik örgü periyodik Hamiltoniyeninde $H(\vec{k}=0)$ bütün m öz

fonksiyonları için, $\langle U_{m0} | \vec{p} | U_{m0} \rangle = 0$ ifadesini kullandık. Bu lineer momentumun matris elemanları simetri özelliğinden doğrudan görülebilir.

Biz bu çalışmamızda III-V bileşik yarıiletkenleri göz önüne alacağız. Bu yarıiletkenler iki yüzey merkezli (fcc) yapının iç içe girmesiyle oluşan zinc-blend örgü yapısına sahiptirler. Küçük k değerlerinde köşegen olmayan terimler küçüktür ve öz fonksiyonlar için en düşük dereceli çözümler

$$c_m^n(\vec{k}) = \delta_{nm} \quad (2.15)$$

dir ve ilgili özdeğerler

$$\epsilon_{nk} = \epsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.16)$$

biçiminde verilir. Eğer köşegen olmayan elemanlar küçükse denklem (2.16) ile verilen öz değer ifadesi ikinci derece pertürbasyon teorisiyle düzeltilir.

$$\epsilon_{nk} = \epsilon_{n0} + \langle U_{n0} | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | U_{m0} \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle U_{n0} | H_I | U_{m0} \rangle \langle U_{m0} | H_I | U_{n0} \rangle}{\epsilon_{n0} - \epsilon_{m0}} \quad (2.17)$$

burada,

$$H_I = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad (2.18)$$

dır. Denklem (2.16)'daki özdeğer ifadesi kuşkusuz bir pertürbasyon olarak

$W(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + H_I$ ve sıfıncı derece Hamiltoniyen çözümü kullanılarak ifade

edilebilir. Kinetik enerji operatörü $\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right)$ skalerdir ve bu nedenle

$\langle U_{n0} | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | U_{m0} \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{nm}$ olarak ifade edilebilir. Bu terim ikinci dereceden

pertürbasyon teorisinde sıfır katkı getirir. Uygun bir şekilde H_I terimininde birinci derece pertürbasyon teorisi için katkısı sıfırdır. İkinci dereceden öz enerji,

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \sum_{m \neq n} \frac{|\vec{p}_{nm} \cdot \vec{k}|}{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}} \quad (2.19)$$

olarak yazılabilir. Burada, $\vec{p}_{nm} = \langle U_{n0} | \vec{p} | U_{m0} \rangle$ dır. \vec{k} vektörü denklem (2.19)'daki integral dışına alınabilir. Bu da öz değerlerin, Γ vadisi yakınlarında dalga vektörü bileşenlerine kuadratik olarak bağlı olduğunu gösterir. Denklem (2.19) daha sık olarak,

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha\beta} k_\alpha \frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} k_\beta \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (2.20)$$

biçiminde yazılır. Burada,

$$\frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} = \frac{1}{m_0} \delta_{nm} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\vec{p}_{nm} \vec{p}_{mn}}{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}} \quad (2.21)$$

etkin kütle tensörüdür.

2.1. Kane Modeli ve Luttinger-Kohn Modeli

1) k.p yaklaşımının genelleştirilmesi

- Önceki bölümde tartışılan **k.p** teorisi aslında pertürbasyon teorisi üzerine dayanmaktadır. Güçlü bant-bant etkileşimlerini de içermek şartıyla daha uygun bir yaklaşım denklem (2.10)'nu sağlamalıdır.
- Denklem (2.10)'da baz durumlarının tam bir setini kapsaması nümerik olarak uygulanabilir değildir. Bununla beraber denklem (2.10)'daki bantlar kuvvetli bantlardır. Ayrık bantların pertürbatif etki yaratmasıyla bu yaklaşım doğrulanır ve $\vec{k} \cdot \vec{p}$ teorisi düzeltilir.
- Eğer elektron bantlarını iki gruba ayırabilirsek bu yöntemin sürekli olarak yapılabileceğini görebiliriz. Birinci grup bantlar içerisinde kuvvetli etkileşimli 8 bant vardır. İkinci grup bantlar yalnızca birinci gruba etkileşen zayıf etkileşimli bantlardır. Bu etkileşme pertürbasyon teori ile çözülebilir.

2) J-J Çiftlenimli Atomik Bloch Seviyeleri

Önceki bölümde tartıştığımız $|U_{n0}\rangle$ orbital atomik Bloch seviyelerinin bir lineer kombinasyonu olarak p-simetrik atomik Bloch seviyelerinin yeni bir baz setini oluşturabiliriz. Yeni baz seti z yönünde J_z bileşenli ve J operatörünün özfonksiyonları olacaktır. Bu yeni baz setini $|J, m_j\rangle$ ile ifade edeceğiz. Burada $J = 3/2, 1/2$ ve $m_j = +j, \dots, -j$ dir. Bu 6 alt bant ifadesini verir. Bu bantlarla beraber s-simetrik iletim bandını da hesaplamalarımıza katacağız. Bu 8 bantlı modelin sonuçları, Γ vadisi yakınlarında III-V bileşik yarıiletkenlerin elektronik bant yapısının iyi bir tanımlamasını verir. Yeni baz setleri tablo 2. 1'deki orbital bileşenleri ile verilir.

u_i	$ J, m_J\rangle$	ψ_{J, m_J}	$\varepsilon_i(k=0)$	
u_1	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ iS \uparrow\rangle$	0	Γ_6
u_3	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X+iY) \downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_5	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X+iY) \uparrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_7	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} (X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow\rangle$	$-\varepsilon_0 - \Delta$	Γ_7
u_2	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ iS \downarrow\rangle$	0	Γ_6
u_4	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} (X-iY) \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_6	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X-iY) \downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_8	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} (X-iY) \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0 - \Delta$	Γ_7

Tablo 2. 1 Γ noktasında atomik baz durumları.

Tablo 2. 1'deki atomik Bloch seviyeleri spin-yörünge etkileşimlerini de içeren

$$H(\vec{k}=0) = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{p}$$

Hamiltoniyenin öz fonksiyonlarıdır. Γ_6

iletim bandını, Γ_8 ağır boşluk ($m_j = \pm 3/2$) ve Γ_8 ($m_j = \pm 1/2$) hafif boşluk bantlarını tanımlar. Γ_7 spin-yörünge bandı olarak bilinir.

Kane Modeli:

Bu modelde her biri iki katlı dejenerer olan dört bantla ilgilenilir. Bunlar iletkenlik bandı, ağır boşluk bandı, hafif boşluk bandı ve spin-yörünge bandıdır. Tablo 2. 1'deki atomik baz durumlarında denklem (2.11)'deki Hamiltoniyenin matris temsili tablo 2. 2'de gösterilmiştir. Hamiltoniyenin elemanlarının bulunması için yapılan işlemler **Ek-1**'de verilmiştir.

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & -\sqrt{\frac{2}{3}}Phk_z & Phk_+ & \sqrt{\frac{1}{3}}Phk_z & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}Phk_- & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}}Phk_- \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}Phk_z & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}Phk_- & 0 & 0 & 0 \\ Phk_- & 0 & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}Phk_z & 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & \sqrt{\frac{2}{3}}Phk_- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}Phk_+ & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}Phk_+ & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & -\sqrt{\frac{2}{3}}Phk_z & Phk_- & \sqrt{\frac{1}{3}}Phk_z \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}Phk_+ & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}}Phk_z & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Phk_+ & 0 & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}Phk_+ & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}Phk_z & 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{bmatrix}$$

Tablo 2. 2 Kane Hamiltoniyeni

$\vec{k} = k\hat{z}$ olduğunu kabul edersek, Tablo 2. 2'deki Hamiltoniyeni kolay bir şekilde köşegen haline getirebiliriz. Bu seçim Hamiltoniyenin izotropik olduğu görüldükten sonra mümkündür ve bu nedenle özdeğer ve özvektörler yalnızca \vec{k} 'nin büyüklüğüne bağlıdır. Bu koordinat sisteminde Hamiltoniyen,

$$H = \begin{pmatrix} H_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & H_{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

şeklinindedir.

Buradaki $H_{4 \times 4}$ matris elemanı,

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z & 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

dır ve $k_z = k$ dır. $\det|H - \varepsilon(k)I| = 0$ denkleminin çözümü ile özdeğerler bulunabilir.

Elde edilen enerji özdeğerlerini denklem (2.12)'de yerine yazarak dalga fonksiyonunu elde ederiz. Şimdi bu denklemi çözersek,

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k & 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(k) \\ c_2(k) \\ c_3(k) \\ c_4(k) \end{pmatrix} = \varepsilon(k) \begin{pmatrix} c_1(k) \\ c_2(k) \\ c_3(k) \\ c_4(k) \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

$$Det \begin{vmatrix} -\lambda(k) & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & -\lambda(k) - \varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k & 0 & 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 - \Delta \end{vmatrix} = 0$$

burada $\lambda(k) = \varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ dir.

$$-\lambda(k) \begin{vmatrix} -\lambda(k) - \varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 - \Delta \end{vmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k \begin{vmatrix} -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k & 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 - \Delta \end{vmatrix} - \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k \begin{vmatrix} -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & -\lambda(k) - \varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda(k) - \varepsilon_0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0$$

$$(\lambda(k) + \varepsilon_0) \left(\lambda(k)(\lambda(k) + \varepsilon_0)(\lambda(k) + \varepsilon_0 + \Delta) + \left(\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k \right)^2 (\lambda(k) - \varepsilon_0 - \Delta) - \left(\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k \right)^2 (\lambda(k) + \varepsilon_0) \right) = 0 \quad (2.25)$$

Karakteristik denklemin $(\lambda(k) + \varepsilon_0)$ ile bölünmesi ile elde edilen denklemden de diğer üç özdeğer bulunur;

$$\lambda(k)(\lambda(k) + \varepsilon_0)(\lambda(k) + \varepsilon_0 + \Delta) - P^2 \hbar^2 k^2 (\lambda(k) + \varepsilon_0 + \frac{2}{3} \Delta) = 0 \quad (2.26)$$

k^2 'nin çok küçük olduğunu kabul edersek, denklem (2.26)'nın üç kökü $\lambda(k) = 0$, $\lambda(k) = -\varepsilon_0$ ve $\lambda(k) = -\varepsilon_0 - \Delta$ 'ya çok yakındır ve bu kökler,

$$\lambda(k) = 0 \Rightarrow \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$\lambda(k) = -\varepsilon_0 \Rightarrow \varepsilon(k) = -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$\lambda(k) = -\varepsilon_0 - \Delta \Rightarrow \varepsilon(k) = -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

biçiminde verilir. Şimdi sırası ile her banda gelen enerji düzeltmelerini hesaplırsak, iletim bandı için, $\varepsilon' \ll \varepsilon_0$ ve $\varepsilon' \ll \Delta$ olmak üzere $\lambda(k) = 0 + \varepsilon'$ olsun, (2.26)'dan

$$\varepsilon'(\varepsilon' + \varepsilon_0)(\varepsilon' + \varepsilon_0 + \Delta) = (P\hbar k)^2 (\varepsilon' + \varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta) \Rightarrow \varepsilon'(\varepsilon_0)(\varepsilon_0 + \Delta) = (P\hbar k)^2 (\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta)$$

$$\Rightarrow \varepsilon' = (P\hbar k)^2 \left(\frac{\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \right)$$

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + (P\hbar k)^2 \left(\frac{\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3\varepsilon_0} + \frac{2P^2}{3\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \right)$$

$$\varepsilon_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \Rightarrow \frac{1}{m_c} = \left(\frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3\varepsilon_0} + \frac{2P^2}{3\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \right) \quad (2.27)$$

sonucuna ulaşılır. Ağır boşluk bandı için, denklem (2.25)'den

$$\varepsilon_{hh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.28)$$

elde edilir. Hafif boşluk bandı için, $\varepsilon' \ll \varepsilon_0$ ve $\varepsilon' \ll \Delta$ olmak üzere; $\lambda(k) = \varepsilon' - \varepsilon_0$ olsun, (2.26)'dan

$$(\varepsilon' - \varepsilon_0)((\varepsilon' - \varepsilon_0) + \varepsilon_0)((\varepsilon' - \varepsilon_0) + \varepsilon_0 + \Delta) = (P\hbar k)^2 ((\varepsilon' - \varepsilon_0) + \varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta)$$

$$(-\varepsilon_0)(\varepsilon') = (P\hbar k)^2 \left(\frac{2}{3} \right) \Rightarrow \varepsilon' = -(P\hbar k)^2 \left(\frac{2}{3\varepsilon_0} \right)$$

$$\varepsilon_{lh} = -\varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \Rightarrow \frac{1}{m_{lh}} = \left(\frac{1}{m_0} - \frac{4P^2}{3\varepsilon_0} \right) \quad (2.29)$$

sonucunu elde ederiz. Spin-yörünge etkileşim bandı için, $\varepsilon' \ll \varepsilon_0$ ve $\varepsilon' \ll \Delta$ olmak üzere $\lambda(k) = \varepsilon' - \varepsilon_0 - \Delta$ olsun, (2.26)'dan

$$(\varepsilon' - \varepsilon_0 - \Delta)((\varepsilon' - \varepsilon_0 - \Delta) + \varepsilon_0)((\varepsilon' - \varepsilon_0 - \Delta) + \varepsilon_0 + \Delta) = (P\hbar k)^2 ((\varepsilon' - \varepsilon_0 - \Delta) + \varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta)$$

$$(-\varepsilon_0 - \Delta)(\varepsilon') = (P\hbar k)^2 \left(\frac{1}{3}\right) \Rightarrow \varepsilon' = -\frac{\hbar^2 k^2 P^2}{3(\Delta + \varepsilon_0)}$$

$$\varepsilon_{so} = -\varepsilon_0 - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}} \Rightarrow \frac{1}{m_{so}} = \left(\frac{1}{m_0} - \frac{2P^2}{3(\varepsilon_0 + \Delta)}\right) \quad (2.30)$$

sonucuna ulaşılır. Bu modelde diğer bantların etkisi hesaba katılmadığından sonuçların tamlığından bahsedilemez.

Luttinger-Kohn Modeli (Ayrık Bantlarla Çiftlenim):

Denklem (2.11)'deki H_0 hamiltoniyenin $|l\rangle$ $l=1, 2, \dots, 8$ öz durumlarına karşılık gelen ε_l enerji özdeğerlerinin enerji skalası üzerinde birbirlerine çok yakın olduğunu kabul edelim. Bu bantlar Kane modelinde dikkate alınan bantlardır. Bu öz durumlar W operatörüyle kuvvetli çiftlenimlidir. H_0 'ın yalnızca W ile zayıf çiftlenimli olduğu başka bir $|v\rangle$ öz durumlar setine sahip olduğunu farzedelim. Şimdi ayrık bantların neden olduğu H_0 'ın en düşük 8 özdeğerine gelen düzeltmeyi hesaplayacağız.

Bu düzeltmeyi içeren denklem (2.11)'in çözümü olan dalga fonksiyonu,

$$\psi = \sum_l c_l |l\rangle + \sum_v c_v |v\rangle \quad (2.31)$$

şeklindedir. Şimdi bu dalga fonksiyonunu denklem (2.11)'de yerine yazarsak,

$$(H(k=0) + W(k)) \left(\sum_l c_l |l\rangle + \sum_v c_v |v\rangle \right) = \varepsilon \left(\sum_l c_l |l\rangle + \sum_v c_v |v\rangle \right) \quad (2.32)$$

elde edilir. Bu ifadeyi soldan kuvvetli çiftlenimli bir dalga fonksiyonu ile çarparsak,

$$\sum_l c_l [(\varepsilon_l - \varepsilon)\delta_{lm} + \langle m|W|l \rangle] + \sum_v c_v \langle m|W|v \rangle = 0 \quad (2.33-a)$$

elde ederiz. Şimdi de denklem (2.32) soldan zayıf çiftlenimli bir dalga fonksiyonu ile çarparsak,

$$\sum_v c_v [(\varepsilon_v - \varepsilon)\delta_{\mu v} + \langle \mu|W|v \rangle] + \sum_l c_l \langle \mu|W|l \rangle = 0 \quad (2.33-b)$$

elde ederiz. Ayrık bantların çiftleniminin zayıf olması sonucuyla eğer dalga fonksiyonu en düşük 8 öz durumdan biriye açılım katsayılarının ilişkili büyüklükleri $c_l \cong 1$, $c_v \ll 1$ sonucuna ulaşabiliriz. Denklem (2.33-b) yardımıyla,

$$c_v \cong \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_v} \sum_l c_l \langle v|W|l \rangle \quad (2.34)$$

elde edilir. Elde ettiğimiz bu sonucu denklem (2.33-a) yerine yazarsak,

$$\sum_l c_l \left[(\varepsilon_l - \varepsilon)\delta_{lm} + \langle m|W|l \rangle + \langle m|W \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_v} W|l \rangle \right] = 0 \quad (2.35)$$

sonucunu elde ederiz. Ayrık bantların etkisini dalga denkleminde,

$$W \rightarrow \tilde{W} = W + W \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_v} W \quad (2.36)$$

ile yer değiştirerek hesabın içine katabileceğimiz sonucuna varırız. Luttinger-Kohn Hamiltoniyeninin çözümü bu ayrık bant operatörünün simetri özellikleri üzerine kurulmuştur. Şimdi bu matris elemanlarını hesaplayarak Luttinger-Kohn Hamiltoniyeninin matris temsilini oluşturalım.

Öncelikle $\tilde{W} - W = W \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_v} W$ operatörünün matris elemanlarını

hesaplamakla işe başlayalım. Ayrık bantların d simetrlili olduğunu göz önüne alacağız. D-simetrisinde baz fonksiyonları,

$$\begin{aligned} & |v_1\rangle f_1(r) XY \\ & |v_2\rangle f_2(r) XZ \\ & |v_3\rangle f_3(r) YZ \\ & |v_4\rangle f_4(r) (X^2 - Y^2) \\ & |v_5\rangle f_5(r) (3Z^2 - r^2) \end{aligned}$$

dir. Bu baz fonksiyonlarının radyal kısımlarının her zaman çift olması nedeniyle sadece açılmalı kısımları ile ilgileneceğiz. Bu matris elemanlarının sıfırdan farklı olup olmadıklarını birkaç örnekle inceleyip bir genelleme yaptıktan sonra matris elemanlarını oluşturalım.

$$\langle X | X | v_1 \rangle \langle v_1 | Z | Z \rangle = \int X^2 (XY) dXdYdZ \times \int Z^2 (XY) dXdYdZ = 0$$

Bu integrantın içi tek fonksiyon olduğundan simetrik aralıkta bu integral sıfırdır.

$$\langle X | X | v_4 \rangle \langle v_4 | Z | Z \rangle = \int X^2 (X^2 - Y^2) dXdYdZ \times \int Z^2 (X^2 - Y^2) dXdYdZ \neq 0$$

Bu integrantın içi çift fonksiyon olduğundan simetrik aralıkta bu integral sıfırdan farklıdır.

$$\langle X | X | v_5 \rangle \langle v_5 | Z | Z \rangle = \int X^2 (3Z^2 - r^2) dXdYdZ \times \int Z^2 (3Z^2 - r^2) dXdYdZ \neq 0$$

içinde doğrudur. X ve Z operatörü yer değiştirdiğimizde,

$$\langle X | Z | v_2 \rangle \langle v_2 | X | Z \rangle = \int XZ (XZ) dXdYdZ \times \int XZ (XZ) dXdYdZ \neq 0$$

ve $\langle X | Z | v_i \rangle \langle v_i | X | Z \rangle = 0$ $i = 4,5$ için elde ederiz. Bu benzerlikle,

$$\begin{aligned}\langle X|Y|v_i\rangle\langle v_i|X|Z\rangle &= \langle X|X|v_i\rangle\langle v_i|Y|Z\rangle = 0 \\ \langle X|Y|v_i\rangle\langle v_i|Z|Z\rangle &= \langle X|Z|v_i\rangle\langle v_i|Y|Z\rangle = 0\end{aligned}$$

olduğunu gösterebiliriz. Bu sonuçların birleşiminden diyagonal olmayan elemanlar için,

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k \langle X|P|v\rangle \langle v|P|Z\rangle k}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = Tk_x k_z$$

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k \langle X|P|v\rangle \langle v|P|Y\rangle k}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = Tk_x k_y$$

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k \langle Y|P|v\rangle \langle v|P|Z\rangle k}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = Tk_y k_z$$

$$T = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle X|P_x|v\rangle \langle v|P_z|Z\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle X|P_x|v\rangle \langle v|P_y|Y\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle Y|P_y|v\rangle \langle v|P_z|Z\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

elde edilir. Ek olarak $\langle X|\tilde{W} - W|Z\rangle = \langle Z|\tilde{W} - W|X\rangle$ simetrisini göstermek kolaydır.

Şimdi de diyagonal elemanlara bakalım,

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k_i \langle X|P_i|v\rangle \langle v|P_j|X\rangle k_j}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = 0 \quad i \neq j$$

Bu integralin tek ya da çift fonksiyon olmasından kaynaklanır. $i = j$ olduğunda

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i=x,y,z} \sum_v \frac{k_i \langle X|P_i|v\rangle \langle v|P_i|X\rangle k_i}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X|P_x|v\rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} (k_x^2) + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X|P_y|v\rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} (k_y^2 + k_z^2)$$

elde edilir. $|\langle X|P_y|v\rangle|^2 = |\langle X|P_z|v\rangle|^2$ simetri özelliği kullanıldı. Şimdi aşağıdaki

tanımları yaparsak,

$$R = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X | P_x | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} \quad \text{ve} \quad S = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X | P_y | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

$\langle X | \tilde{W} - W | X \rangle = Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2)$ elde etmiş oluruz. Bu yöntemi kullanarak diğer diyagonal elemanları da elde ederiz. Bu ek bilgilerden sonra matris elemanlarını oluşturmaya başlayabiliriz. Baz fonksiyonları olarak tablo 2. 1'deki atomik baz durumlarını kullanarak $\tilde{W} - W$ matris temsili tablo 2. 3'de gösterilmiştir. $\tilde{W} - W$ nin elemanlarının bulunması için yapılan işlemler **Ek-2**'de verilmiştir.

	$ iS \uparrow\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ iS \downarrow\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle iS \uparrow $	$\frac{\hbar^2 k^2}{2} (\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0})$	0	0	0	0	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} $	0	$G - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	iH^*	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	0	0	I	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H$
$\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} $	0	$-iH$	$F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	0	$-I$	0	$-\sqrt{2}I$
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$\sqrt{2}I$	0
$\langle iS \downarrow $	0	0	0	0	$\frac{\hbar^2 k^2}{2} (\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0})$	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} $	0	0	$-I^*$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	0	$G - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-iH$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} $	0	I^*	0	$\sqrt{2}I^*$	0	iH^*	$F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H^*$
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	0	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$-\sqrt{2}I^*$	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

Tablo 2.3 $\tilde{W} - W$ matris temsili

Tablo 2. 1'deki atomik baz durumlarını kullanarak W ve $H(k=0)$ matris temsilleri tablo 2. 4'de ve tablo 2. 5'de sırasıyla gösterilmiştir.

	$ iS \uparrow\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ iS \downarrow\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle iS \uparrow $	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_+$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$
$\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} $	$P\hbar k_-$	0	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$\langle iS \downarrow $	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_-$
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} $	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} $	0	0	0	0	$P\hbar k_+$	0	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

Tablo 2. 4 W 'nin matris temsili

	$ iS \uparrow\rangle$	$\left \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$	$\left \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle$	$\left \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$	$ iS \downarrow\rangle$	$\left \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$
$\langle iS \uparrow $	0	0	0	0	0	0	0	0
$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right $	0	$-\varepsilon_0$	0	0	0	0	0	0
$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right $	0	0	$-\varepsilon_0$	0	0	0	0	0
$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right $	0	0	0	$-\varepsilon_0 - \Delta$	0	0	0	0
$\langle iS \downarrow $	0	0	0	0	0	0	0	0
$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right $	0	0	0	0	0	$-\varepsilon_0$	0	0
$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right $	0	0	0	0	0	0	$-\varepsilon_0$	0
$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right $	0	0	0	0	0	0	0	$-\varepsilon_0 - \Delta$

Tablo 2.5 $H(\vec{k} = 0)$ matris temsili

Tablo 2. 3, tablo 2. 4 ve tablo 2. 5’de elde edilen matris temsilleri yardımıyla Luttinger-Kohn Hamiltoniyenini oluşturulabilir. Aşağıdaki tanımları yaparak Luttinger-Kohn Hamiltoniyenini tablo 2. 6’daki gibi oluşturulabilir.

$$\gamma_1 = -\frac{m_0}{\hbar^2} \frac{1}{3} (2L + 4M) = -\frac{m_0}{\hbar^2} \frac{1}{6} (5R + S)$$

$$\gamma_2 = -\frac{m_0}{\hbar^2} \frac{1}{3} (L - M) = -\frac{m_0}{\hbar^2} \frac{1}{3} (R - S)$$

$$\gamma_3 = -\frac{m_0}{3\hbar^2} N = -\frac{m_0}{3\hbar^2} T$$

$$F(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2]$$

$$G(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2]$$

$$H(k) = \frac{\hbar^2}{m_0} \sqrt{3} \gamma_3 k_z (k_x - ik_y), I(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y]$$

	$ iS \uparrow\rangle$	$\left \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$	$\left \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle$	$\left \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$	$ iS \downarrow\rangle$	$\left \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$
$\langle iS \uparrow $	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_+$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$
$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$G - \varepsilon_0$	iH^*	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	I	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H$
$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right $	$P\hbar k_-$	$-iH$	$F - \varepsilon_0$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	0	$-I$	0	$-\sqrt{2}I$
$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right $	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G)$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$\sqrt{2}I$	0
$\langle iS \downarrow $	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c}$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_-$
$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right $	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	$-I^*$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$G - \varepsilon_0$	$-iH$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$
$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right $	0	I^*	0	$\sqrt{2}I^*$	$P\hbar k_+$	iH^*	$F - \varepsilon_0$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H^*$
$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$-\sqrt{2}I^*$	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G)$

Tablo 2. 6 Luttinger-Kohn hamiltoniyyenin matris temsili

2. 2. SEYRELTIK III-N-V YARIİLETKENLER

III-N-V yarıiletkenler son yıllarda keşfedilen III-V ve II-VI yarıiletken alaşımların yeni bir alt grubudur. Bu yeni alaşımlar, elektronik seviyeleri yerel iletim bandı ile rezonansa olan izolelektronik safsızlıkların (N gibi) çok küçük bir miktarda ana yarıiletkene (GaAs gibi) katılmasıyla elde edilmiştir. Yer değiştiren yerel negatif iyon (As) ile safsızlık atomu (N) arasında elektronegatiflik ve atom yarıçapındaki büyük farklılıklar nedeni ile yerel bant yapısı önemli ölçüde değişime uğrar. Böylece bu alaşımların bant yapıları, geleneksel III-V grubu yarıiletken alaşımlardan tamamen farklıdır.

(Ga,In)(N,As) alaşımları III-V ve II-VI yarıiletkenlerinin yeni bir alt grubunun en popüler üyeleridir. Son yıllarda bu alaşım sistemlerin büyütülmesi ve potansiyel uygulamaları üzerine birçok araştırma grubu yoğun ilgi göstermiştir. Bu alaşım sistemleri güneş pilleri ve optik iletişim sistemleri için lazer aygıtları gibi birçok alanda kullanılmaktadır. Bu yeni sınıf yarıiletken malzeme III-N-V yarıiletkenlerin en fazla ilgi gösterilen üyesi olmuştur. Bizde bu çalışmada bu malzemenin elektronik bant yapısını inceleyeceğiz.

$Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ yarıiletken malzemesi geleneksel (Al, Ga)As, (Ga,In)As ve (Ga,As)P gibi III-V bileşiklerinden oldukça farklıdır ve çok çarpıcı yeni özellikler gösterir. (Ga,In)As veya GaAs yarıiletken malzemesine çok küçük miktarda azot safsızlığı katıldığında elektronik bant yapısında büyük değişimler olmaktadır. Bu değişimleri; bant aralığının geniş bir şekilde kırmızıya kayması, elektronun etkin kütlelerinde önemli bir artma, yeni bantların şekillenmesi, vb. sıralayabiliriz.

Bütün bu değişimlerin sebebi As ve N atomları arasındaki elektronegatiflik ve atom yarıçaplarının oldukça farklı olmasından kaynaklanır. Bir yarıiletken malzeme (GaAs) içerisine çok küçük miktarda azot safsızlığının katılması sonucu ile kristal örgü bozulur ve yeniden şekillenir. Yeni oluşan bu kristal örgü yapısında lokalize bir azot seviyesi oluşur. Oluşan bu azot seviyesi GaAs kristalinin iletim bandı (CB) kenarından yaklaşık 180 meV yukarisındadır [25-30].

(Ga,In)(N,As) ve (Ga,N)As bant yapısı geleneksel III-V yarıiletkenlerden tamamen farklı olduğu için, III-V ve II-VI yarıiletkenlerinin elektronik bant yapısını elde etmek için yaygın olarak kullanılan 8 bant **k.p** modeli (Ga,In)(N,As) elektronik bant yapısını elde etmede kullanılamaz. (Ga,In)(N,As) bant yapısını tasvir etmek için yeni bir 10 bant **k.p** modeli kullanılır. Bu 10 bant **k.p** modeli geleneksel 8 bant

Hamiltonian'ın iletim bandı ve lokalize azot durumları arasındaki etkileşimi basit bir model ile modifiye edilmesinden elde edilir.

Böylece (Ga,In)(N,As) yarıiletkenin iletim bant yapısını hesaplamak için anti-crossing (BAC) modeli ve valans bant yapısını hesaplamak için 6-bant Luttinger –Kohn Hamiltonian kullanılır.

2. 3. Bant Anti-Crossing (BAC) Yaklaşımı

Hem parabolik hem de **k.p** modellerinde, BAC yaklaşımı genellikle iletim bant yapısı üzerine azot (N) etkisini hesaba katmak için kullanılır. GaAs valans bandı ile ilişkili lokalize E_N azot seviyelerinin konumu tight-binding hesaplamalar kullanılarak modellenebilir. Oldukça düşük azot oranlarında ayırık safsızlıkların dalga fonksiyonu üst üste binmez, böylece lokalize rezonans enerjisi izole kusur enerjisine E_N^0 eşit olur. Ancak, uygulanabilir seyreltik azotlarda, dalga fonksiyonları düşük azot oranlarında bile overlapa başlar. %5 azottan daha az malzemelerde dalga fonksiyonlarındaki overlap rezonans enerjisinde bir azalmaya neden olur. Bu azalma aşağıdaki denklem ile verilir.

$$E_N = E_N^0 - \gamma y \quad (2.37)$$

burada E_N^0 izole azot kusuru enerjisidir ve genellikle 1.7 eV [31–36] olarak alınır. γ ise 3.89 eV [36] yada 2.52 eV [31] olarak alınır.

Denk(2.37) GaNAs için çözülmüştür, fakat GaInNAs için E_N 'in konumu üzerine indiyum mol oranı hesaba katılmalıdır. Sınırlamalara rağmen farklı III-V alaşımlardaki E_N lokalizasyonu üzerine yapılan deneysel gözlemler göstermiştir ki, birçok yüksek lokalize seviyelerde bile azot seviyesi boşluk seviyesi ile ilişkili olarak sabit kalır. Bu yüzden GaAs valans bandı ve seyreltik azot arasındaki bant uyuşması etkileri E_N ve E_M seviyelerinin relatif konumları ile ilişkili olarak kendiliğinden bulunabilir.

Uygulayacağımız modelde azot seviyelerinin valans bantları ile etkileşmediği kabul edilmiştir. Bu da valans bantları ve E_N arasındaki ayırımı veren uygun bir yaklaşımdır. BAC yaklaşımında yoğun lokalize azot durumlu E_N ve genişlemiş iletim

bandı E_M arasındaki etkileşim pertürbasyon teori kullanılarak aşağıdaki özdeğer denklemi ile çözülür.

$$\begin{vmatrix} E - E_M & V_{MN} \\ V_{MN} & E - E_N \end{vmatrix} = 0 \quad (2.38)$$

burada V_{MN} iki seviye arasındaki etkileşimi tanımlayan matris elemanıdır. İletim bandı dağılım ilişkisi için özdeğer denkleminin çözümü,

$$E_{\pm}(k) = \frac{E_N + E_M(k) \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4V_{MN}^2}}{2} \quad (2.39)$$

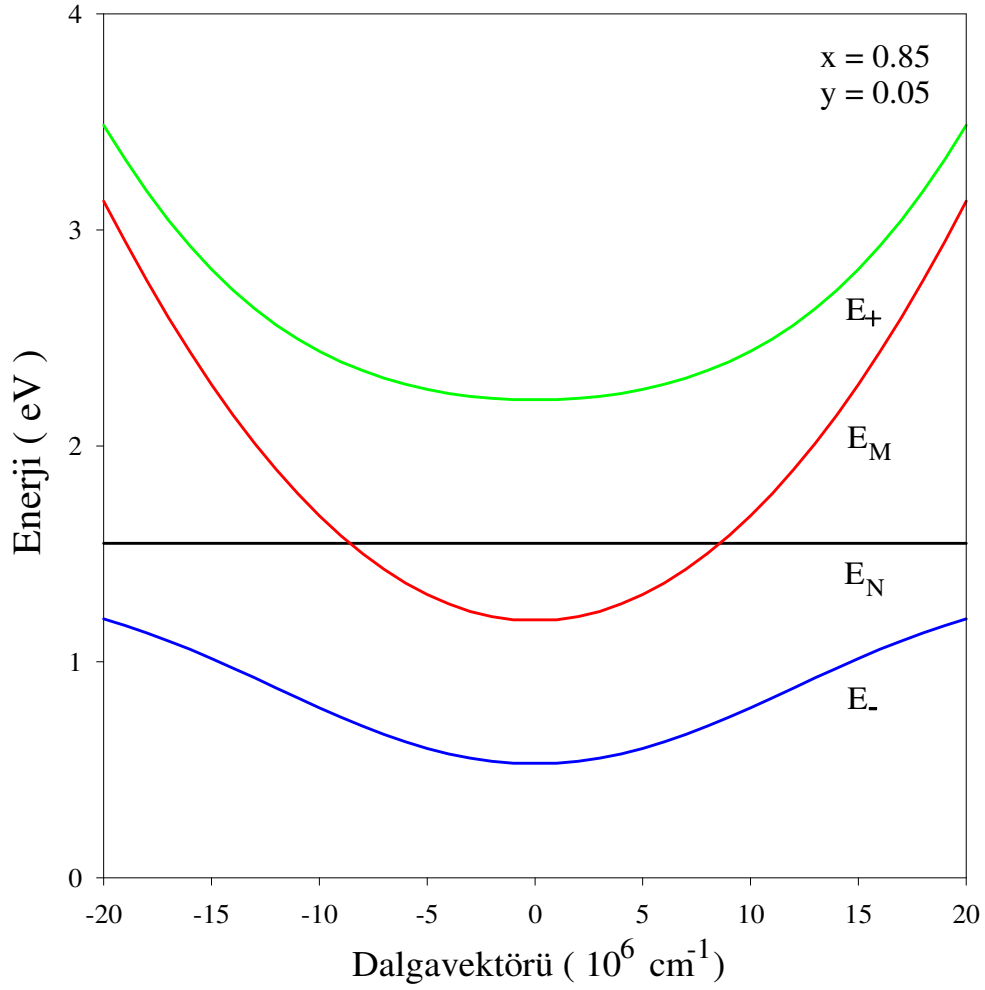
şeklinde elde edilir. V_{MN} matris elemanı aşağıdaki denklemle ifade edilir.

$$V_{MN} = \sqrt{\beta} y \quad (2.40)$$

burada $\beta = 1.675 \text{ eV}$ [37] ve y azot konsantrasyonudur. İletim bandındaki genişleme nedeni ile E_M parabolik olarak kabul edilmiştir ve GaAs valans bandı ile ilişkili olarak hesaplanan iletim bandı sınırına eşit bir enerji ile $k=0$ da bir minimuma sahiptir. Genişleme durumu için dağılım bağıntısı

$$E_M(k) = E_M(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.41)$$

ile verilir. Burada k dalga vektörü ve m^* InGaAs elektron etkin kütleleridir. İletim bandı dağılım eğrisi, bölge merkezine yakın k değerlerinin bir dağılımı için denk (2.39) ve denk (2.41) birleştirilmesi ile çözülür. Elde edilen çözüm şekil 2. 1’de gösterilmiştir.



Şekil 2. 1 BAC modelindeki GaInNAs şematik bant yapısı. E_N lokalize azot durumu, E_M yayılmış yarıiletken durumu, E_+ BAC modelindeki E_+ , E_- BAC modelindeki E_- seviyesidir.

Şekil 2. 1 E_N, E_M ve seyreltik azot bant yapısının dağılım eğrisini göstermektedir. Denk (2.39)'ün iletim bandının iki ayrı banda yarılmasını gösteren olası iki çözümü vardır (E_+, E_-). E_- E_M seviyesinin altında ve E_+ E_M seviyesinin üstündedir. E_- enerji seviyesindeki azalma yayılım enerjisindeki gözlemlenen azalma ile ilişkilidir. Mevcut modelde E_- seviyesinin konumu iletim bandının en alt noktası olarak alınır.

2. 4. III-N-V Külçe Yarıiletkenler için 6+4 bant k.p Teorisi

Bu bölümde III-N-V külçe yarıiletken malzemesinin bant yapısının elde edilmesi için 6+4 bant **k.p** teorisi incelenecektir. Bu modelin sonuçları, Γ vadisi yakınlarında III-N-V bileşik yarıiletkenlerin elektronik bant yapısının iyi bir tanımlamasını verir. Bu modelde yapının iletim ve valans bantlarının etkileşmediği kabul edilmektedir [38]. İlk olarak azot katkısının iletim bandı üzerindeki oluşturduğu etkiyi inceleyelim. Hesaplama da kullanılacak yeni baz seti tablo 2. 7'deki orbital bileşenleri ile verilir.

u_i	$ J, m_J\rangle$	ψ_{J, m_J}
u_1	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ S_N \uparrow\rangle$
u_2	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ S_N \downarrow\rangle$
u_3	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ S \uparrow\rangle$
u_4	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ S \downarrow\rangle$

Tablo 2. 7 Atomik Bloch Seviyeleri

Bu bazlar kullanılarak Hamiltoniyenin matrisi elemanları sırası ile hesaplanırsa, sıfırdan farklı matris elemanları,

$$H_{11} = \langle S_N \uparrow | H(k) | S_N \uparrow \rangle = E_N$$

$$H_{22} = \langle S_N \downarrow | H(k) | S_N \downarrow \rangle = E_N$$

$$H_{31} = \langle S \uparrow | H(k) | S_N \uparrow \rangle = V_{NC}$$

$$H_{42} = \langle S \downarrow | H(k) | S_N \downarrow \rangle = V_{NC}$$

$$H_{13} = \langle S_N \uparrow | H(k) | S \uparrow \rangle = V_{NC}$$

$$H_{24} = \langle S_N \downarrow | H(k) | S \downarrow \rangle = V_{NC}$$

$$H_{33} = \langle S \uparrow | H(k) | S \uparrow \rangle = E_C$$

$$H_{44} = \langle S \downarrow | H(k) | S \downarrow \rangle = E_C$$

şeklindedir. Bu sonuçlarla Hamiltoniyeenin matris temsili aşağıdaki tanımlar yapılarak,

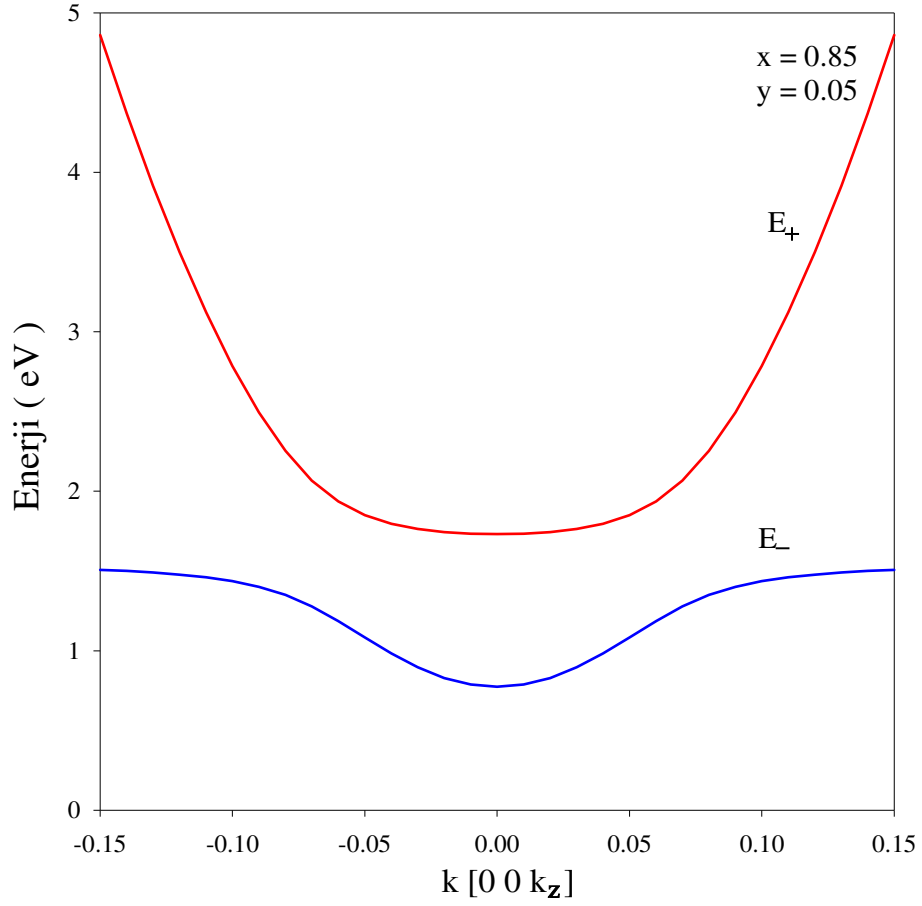
$$E_N = 1.675 - 2.52y$$

$$V_{NC} = \sqrt{\beta}y, \beta = 1.675 \text{ eV}$$

$$E_C = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$H_k + H_s = \begin{bmatrix} E_N & 0 & V_{NC} & 0 \\ 0 & E_N & 0 & V_{NC} \\ V_{NC} & 0 & E_C & 0 \\ 0 & V_{NC} & 0 & E_C \end{bmatrix}$$

olarak ifade edilir. Burada m^* InGaAs bileşiğinin etkin kütle değeridir. Bu Hamiltoniyeen matrisinin çözülmesi ile elde edilen iletim bant yapısı aşağıdaki şekil 2. 2' de gösterilmiş.



Şekil 2. 2 4-bant modeli kullanılarak elde edilen Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} külçe yapısının iletim bandının şematik gösterimi

İkinci aşamada III-N-V yapısının valans bandını inceleyelim. Hesaplamalarda kullanacağımız baz seti tablo 2. 8 orbital bileşenleri ile verilmiştir.

u_i	$ J, m_J\rangle$	ψ_{J, m_J}
u_1	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow\rangle$
u_2	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$
u_3	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow\rangle$
u_4	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle$
u_5	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow\rangle$
u_6	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} (X - iY) \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow\rangle$

Tablo 2. 8 Atomik Bloch Seviyeleri

Bu bazlar kullanılarak oluşan Hamiltoniyeenin matris temsili aşağıdaki tanımlar yapılarak,

$$F(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1^L + \gamma_2^L)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1^L - 2\gamma_2^L)k_z^2]$$

$$G(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1^L - \gamma_2^L)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1^L + 2\gamma_2^L)k_z^2]$$

$$H(k) = \frac{\hbar^2}{m_0} \sqrt{3} \gamma_3^L k_z (k_x - ik_y),$$

$$I(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [\gamma_2^L (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3^L k_x k_y]$$

$G - \varepsilon_0$	iH^*	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	0	I	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H$
$-iH$	$F - \varepsilon_0$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$-I$	0	$-\sqrt{2}I$
$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$\sqrt{2}I$	0
0	$-I^*$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$G - \varepsilon_0$	$-iH$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$
I^*	0	$\sqrt{2}I^*$	iH^*	$F - \varepsilon_0$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H^*$
$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$-\sqrt{2}I^*$	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta$

Tablo 2. 9 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ valans bant matris temsili.

biçiminde ifade edilir. İnceleyeceğimiz yapıdaki $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ yarıiletkeni için materyal parametre değerleri, aşağıdaki ikili yarıiletken parametreleri arasındaki lineer ilişki kullanılarak elde edilmiştir.

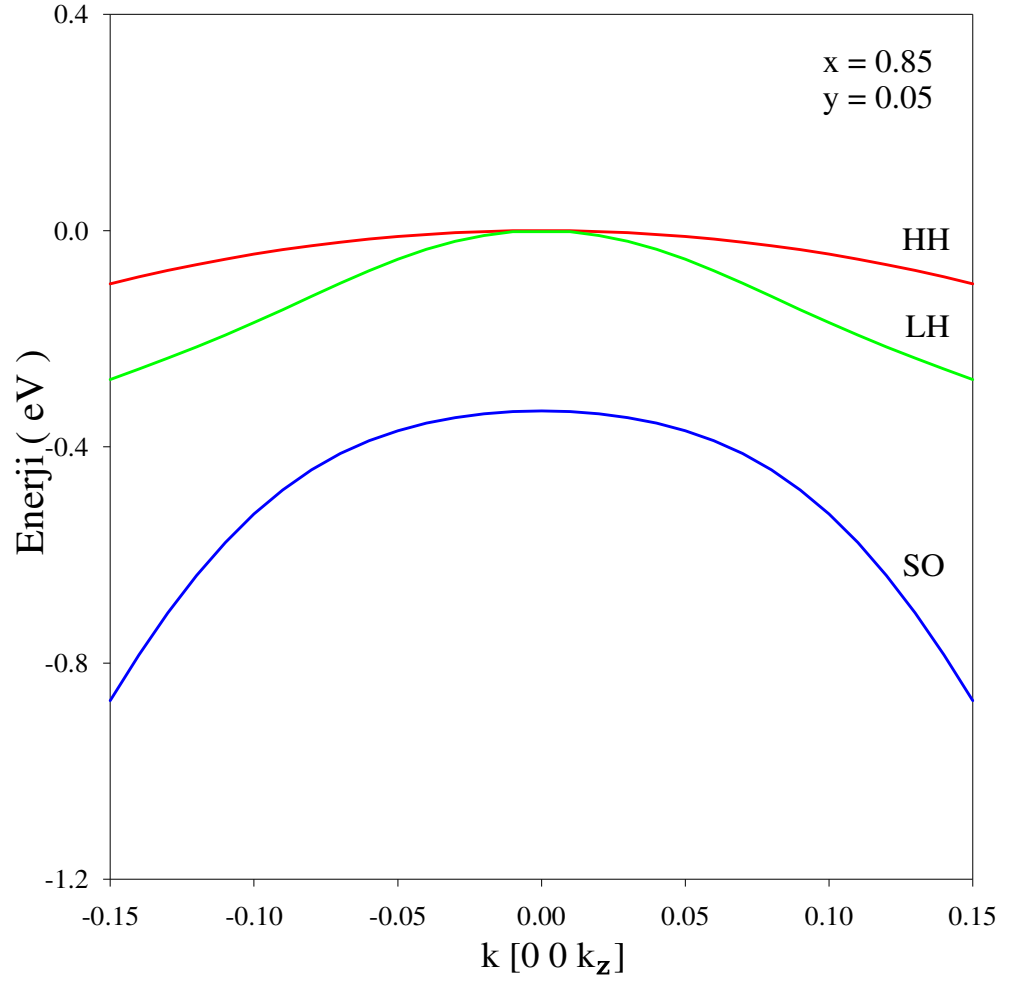
$$P(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}) = xyP(\text{GaN}) + x(1-y)P(\text{GaAs}) + y(1-x)P(\text{InN}) + (1-x)(1-y)P(\text{InAs}) \quad (2.42)$$

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ dörtlü bileşiği için hesaplamalarımızdaki kullandığımız bant parametreler Ref. 39'dan alınmıştır ve bu parametreler tablo 2. 10'da gösterilmiştir.

Materyal	GaAs	InAs	GaN	InN
$\Delta(\text{eV})$	0.341	6.0583	4.50	4.98
γ_1^L	6.98	20.00	2.67	3.72
γ_2^L	2.06	8.50	0.75	1.26
γ_3^L	2.93	9.20	1.10	1.63

Tablo 2. 10 Bant yapısı hesaplamalarında kullanılan ikili bileşikler için parametreler.

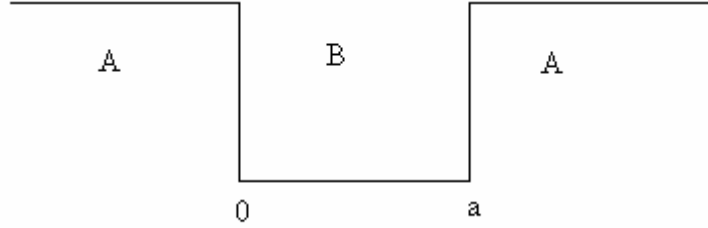
Bu Hamiltoniyen matrisinin çözülmesi ile elde edilen valans bant yapısı şekil 2. 3'de verilmiş.



Şekil 2. 3 6-bant modelinde $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ külçe yapısının valans bandının şematik gösterimi.

3. ETKİN KÜTLE YAKLAŞIMI (Zarf Fonksiyonu Yaklaşımı)

A ve B gibi iki farklı materyalli heteroyapıyı göz önüne alalım. Yapacağımız tartışmayı B kuyu materyalli ve A bariyerli kuantum kuyu yapıları için uygulayalım. Bu materyallerin direk bant aralıklı yarıiletkenler olduğunu varsayalım.



Şekil 3. 1 Kuantum kuyu profili.

A materyalindeki bir parçacığın durumu her zaman,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_m F_m^A(\vec{r}) U_{mk_0}^A(\vec{r}) \quad (3.1-a)$$

biçiminde yazılabilir. Burada direk bant aralıklı materyaller için $k_0 = 0$ dır. Eğer biz buradaki toplamı sadece atomik durumların tam seti üzerinden alırsak, ikinci bölümde tartışmış olduğumuz dalga denkleminin tam bir çözümünü elde etmiş oluruz.

B materyalindeki bir parçacığın durumu da benzer olarak,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_m F_m^B(\vec{r}) U_{mk_0}^B(\vec{r}) \quad (3.1-b)$$

şeklinde yazılır. Şimdi biz toplam dalga fonksiyonunun heteroyapı boyunca yayıldığını kabul edeceğiz. Bu durum açıkça konuma bağlı ağırlık faktörlerinin $F_m^{A,B}$ zarf dalga fonksiyonları olarak isimlendirildiği bazı özel şartların yerine getirilmesiyle gösterilebilir.

Biz burada toplam dalga fonksiyonlarının atomik kısımlarının özdeş olduğu çok özel bir yaklaşım yapacağız. ($k_0 = 0$)

$$U_{m0}^A = U_{m0}^B \quad (3.2)$$

$U_{m_0}^A, U_{m_0}^B$ dalga fonksiyonlarının özdeş yapılarına rağmen farklı özdeğerlerle ilişkilidir. Bundan sonra yapacağımız işlemlerde ilk olarak bütün spine bağlı terimleri geçici olarak ihmal edeceğiz.

Bu nedenle sıfıncı derece atomik Hamiltoniyen $H_0 = H(k=0)$ toplam Hamiltoniyenle özdeştir. Atomik kısımlar,

$$\begin{aligned} \left[\frac{p^2}{2m_0} + V_A \right] U_{m_0}^A(\vec{r}) &= \epsilon_{m_0}^A U_{m_0}^A(\vec{r}) \\ \left[\frac{p^2}{2m_0} + V_B \right] U_{m_0}^B(\vec{r}) &= \epsilon_{m_0}^B U_{m_0}^B(\vec{r}) = \epsilon_{m_0}^B U_{m_0}^A(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.3)$$

denklemlerinin çözümleridir. Bu denklemler eğer potansiyeller şekil olarak özdeş fakat sabit bir çarpan kadar farklıysa aynı zamanda $\langle m | V_A - V_B | m \rangle = \epsilon_{m_0}^A - \epsilon_{m_0}^B$ de gerçekleştirilmelidir. Dikkat etmek gerekirse V_{AB} atomik seviyelerle ilişkili periyodik potansiyellerdir. Bu potansiyeller örneğin kuşatılmış taşıyıcıların neden olduğu yavaş değişen potansiyelleri içermezler.

Takip edeceğimiz işlemlerde bir kuantum kuyusu durumunda $F_m^{A,B}$ zarf fonksiyonları için dalga denklemini çözeceğiz. Denklem (3.1)'deki atomik seviyeler ortanormaldir ve kuantum kuyusunun $z=0$ ve $z=a$ ara yüzeylerinden geçen dalga fonksiyonu sürekli ve $F_m^A(\vec{r}_\perp, a) = F_m^B(\vec{r}_\perp, a)$ koşulunu sağlarlar.

Burada \vec{r}_\perp kuantum kuyusu düzlemindeki konum vektörünün bileşenleridir ve a kuantum kuyusunun (QW) genişliğidir. Periyodik sınır şartları QW düzlemine dik z yönünde geçerli değildir. Bu nedenle zarf dalga fonksiyonları,

$$F_m^{A,B} = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \chi_m^{A,B}(z) \quad (3.4)$$

olarak verilir. Burada \vec{k}_\perp QW düzlemindeki dalga vektörünün bileşenleridir. S kuantum kuyusu düzlemindeki örnek bölgenin alanıdır. Basamak fonksiyonlarını kullanarak Hamiltoniyeni,

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_A(\vec{r})Y_A + V_B(\vec{r})Y_B \quad (3.5)$$

formunda yazabiliriz. Burada $Y_A(z) = 0, Y_B(z) = 1 \quad z \in (0, a)$ ve $Y_A(z) = 1, Y_B(z) = 0 \quad z \notin (0, a)$ dir. Bu Hamiltoniyeni kullanarak denklem (3.3) yeniden

$$HU_{m_0}(\vec{r}) = (\varepsilon_{m_0}^A Y_A + \varepsilon_{m_0}^B Y_B)U_{m_0}(\vec{r}) \quad (3.6)$$

biçiminde ifade edebiliriz. Denklem (3.4) ve denklem (3.1) ifadelerinin birleşimlerinden toplam düzlem Bloch fonksiyonu,

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \sum_m \chi_m^{A,B}(z) U_{m_0} \quad (3.7)$$

olarak verilir.

3. 1. İletim Bandı

Çiftlenimsiz iletim bandını göz önüne alacak olursak, bu durumda denklem (3.7)'deki toplamda yalnızca $j = c$ teriminden oluşacaktır. Dalga denklemi,

$$H\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}) \quad (3.8)$$

dir. Burada,

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_A(\vec{r}) \quad (3.9)$$

biçiminde verilmektedir. Bloch durumunu denklem (3.8)'de yerine yazarsak,

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_A(\vec{r}) \right] \frac{1}{\sqrt{S}} \exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) = \varepsilon \frac{1}{\sqrt{S}} \exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \quad (3.10)$$

denklem (3.10) elde edilir. Bu ifadeyi çözmeye kinetik enerji terimiyle başlayalım,

$$\frac{p^2}{2m_0} = \frac{p_{\perp}^2}{2m_0} + \frac{p_z^2}{2m_0} \quad (3.11)$$

Lineer momentumun düzlemsel bileşeni,

$$\begin{aligned} p_{\perp} \left[\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \hbar k_{\perp} \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ &\quad + \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) p_{\perp} U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ (p_{\perp})^2 \left[\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \hbar^2 k_{\perp}^2 \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ &\quad + 2\hbar k_{\perp} \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) p_{\perp} U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) (p_{\perp})^2 U_{c_0}(\vec{r}) \right) \end{aligned}$$

Lineer momentumun z bileşeni,

$$\begin{aligned} p_z \left[\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] p_z \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ &\quad + \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) p_z U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ (p_z)^2 \left[\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] (p_z)^2 \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \\ 2 \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] p_z \chi_c^A(z) p_z U_{c_0}(\vec{r}) \right) &+ \left(\exp \left[i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp} \right] \chi_c^A(z) (p_z)^2 U_{c_0}(\vec{r}) \right) \end{aligned}$$

elde edilir. Kuyu durumunda kinetik enerji terimi de bu ifadedeki A indisi yerine B indisini yazmakla elde etmiş oluruz. Şimdi dalga denklemimizi soldan

$$\frac{1}{\sqrt{S}} \exp(-i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp}) \chi_c^{*(A,B)}(z) U_{c_0}^* \quad (3.12)$$

ile çarpıp tüm kristal üzerinden integralini alacağız. Kristal hacmi üzerinden alacağımız integraldeki A, B indisleri kuyu bölgesinde χ_B bariyer bölgesinde χ_A zarf fonksiyonunu kullanacağımızı gösterir. Gerekli ara işlemler (**Ek-3**) yapılarak,

$$\int_{\text{tüm } z} \chi_c^{*(A,B)} \left[\varepsilon_{c_0}^A Y_A + \varepsilon_{c_0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar k_{\perp}}{m_0} \langle c | P_{\perp} | c \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle c | P_z | c \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \chi_c^{(A,B)} dz = \int_{\text{tüm } z} \chi_c^{*(A,B)} \varepsilon \chi_c^{(A,B)} dz \quad (3.13)$$

denklem (3.13) elde edilir. Bu ifade aslında çok iyi bildiğimiz standart bir özdeğer denklemi formundadır.

$$\langle \chi | H - \varepsilon | \chi \rangle = 0 \quad (3.14)$$

Burada Hamiltoniyen,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_0} + \frac{\hbar k_{\perp}}{m_0} \langle c | P_{\perp} | c \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle c | P_z | c \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.15)$$

ile verilir ve $V_c(z) = \varepsilon_{c_0}^A Y_A + \varepsilon_{c_0}^B Y_B$ dir. Bu heteroyapı potansiyel bant süreksizliğinin sonucudur. Diyagonal dipol matris elemanları sıfırdır ve bu sonuçla denklem (3.15) aşağıdaki hale indirgenir.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_0} \quad (3.16)$$

3. 2. Çiftlenimli Bantlar ve Zarf Dalga Fonksiyonları

Bu bölümde ayrıık zayıf çiftlenimli bantlar ve 8 kuvvetli çiftlenimli bandı göz önüne alacağız. Önceki bölümde pertürbasyon teorisi ve yapılandırma etkileşimlerini temel alarak oluşturduğumuz külçe III-V yarıiletkenler için işlemlerimizi, konumdan bağımsız c_l (kuvvetli çiftlenimli bantlar) ve c_v (ayrıık bantlar) sabitleri yerine zarf fonksiyonlarını kullanarak değiştireceğiz.

Spin-orbit etkileşimini de içeren periyodik Hamiltoniyen,

$$H(k=0) = \frac{p^2}{2m_0} + V_{A,B}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_{A,B}) \cdot \vec{p} \quad (3.17)$$

biçimindedir.

Aşağıdaki rotasyonla spin-yörünge etkileşimi ve periyodik potansiyel gösterimi

$$V_{A,B}^s(\vec{r}) = V_{A,B}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_{A,B}) \cdot \vec{p} \quad (3.18)$$

şeklinde kısaltılabilir. Bu gösterimle denklem(3. 3),

$$\begin{aligned} \left[\frac{P^2}{2m_0} + V_A^s(r) \right] U_{m_0}^A(r) &= \varepsilon_{m_0}^A U_{m_0}^A(r) \\ \left[\frac{P^2}{2m_0} + V_B^s(r) \right] U_{m_0}^B(r) &= \varepsilon_{m_0}^B U_{m_0}^B(r) = \varepsilon_{m_0}^B U_{m_0}^A(r) \end{aligned} \quad (3.19)$$

olarak yazılabilir. Bu sonuçla atomik Bloch seviyeleri artık $U_{m_0}^{A,B}(\vec{r}) = U_{m_0}(\vec{r})$ tablo2.1 deki durumlara eşit olur. Tek bant durumundaki örnek gibi düzlemsel Bloch durumu öz değer denklemini sağlamalıdır.

$$\begin{aligned} \left[\frac{p^2}{2m_0} + V_{A,B}^s(\vec{r}) \right] \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \left(\sum_l \chi_l^{(A,B)}(z) u_{l_0}(\vec{r}) + \sum_v \chi_v^{(A,B)}(z) u_{v_0}(\vec{r}) \right) = \\ \varepsilon \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \left(\sum_l \chi_l^{(A,B)}(z) U_{l_0}(\vec{r}) + \sum_v \chi_v^{(A,B)}(z) U_{v_0}(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Bu ifade de kuvvetli ve ayırık bantlar üzerinden toplamları ayırabiliriz. Şimdi külçe yarıiletkenlerde ki çözüme benzer şekilde özdeğer denkleminin çiftlenimli bir setini çözebiliriz. Yukarıdaki dalga denklemini soldan,

$$\frac{1}{\sqrt{S}} U_{m_0}^*(\vec{r}) \exp(-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \chi_m^{*(A,B)}(z) \quad (3.21)$$

ile çarpıp kristal hacmi üzerinden integre edelim. Burada m kuvvetli çiftlenimli seviyelerden biridir. Tek bant durumundaki gibi aynı adımları takip edersek,

$$\sum_l \left\{ \left[\varepsilon_{m0}^A Y_A + \varepsilon_{m0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \varepsilon \right] \delta_{jl} + \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle m | p_\perp | l \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle m | p_z | l \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_l^{(A,B)} \quad (3.22)$$

$$+ \sum_v \left\{ \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle m | p_\perp | v \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle m | p_z | v \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_v^{(A,B)} = 0$$

elde ederiz. Benzer şekilde ayrı bantlardan biri olan,

$$\frac{1}{\sqrt{S}} u_{\mu 0}^*(\vec{r}) \exp(-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \chi_\mu^{*(A,B)}(z) \quad (3.23)$$

ile dalga denklemini soldan çarpıp integre edersek,

$$\sum_v \left\{ \left[\varepsilon_{v0}^A Y_A + \varepsilon_{v0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \varepsilon \right] \delta_{\mu l} + \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle \mu | p_\perp | v \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle \mu | p_z | v \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_v^{(A,B)}$$

$$+ \sum_l \left\{ \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle \mu | p_\perp | l \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle \mu | p_z | l \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.24)$$

elde ederiz. Bu iki ifade,

$$\langle m | W | l \rangle = \frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle m | p_\perp | l \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle m | p_z | l \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad m \neq l \quad (3.25-a)$$

$$\langle m | W | l \rangle = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad m = l \quad (3.25-b)$$

ile yer değiştirilebilir. Eğer külçe yapıdaki W operatöründeki $k_z = i \frac{\partial}{\partial z}$ ile ve konumdan bağımsız sabitler c_l, c_v zarf fonksiyonları ile yer değiştirirse denk(3.22) ve denk(3.24) elde edilir. Denk(3.25-a) ve denk(3.25-b) yardımıyla denk(3.22) ve denk(3.24) şu şekilde ifade edilebilir,

$$\sum_l \left\{ \left[\varepsilon_{m0}^A Y_A + \varepsilon_{m0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \langle m | \tilde{W} | l \rangle \right\} \chi_l^{(A,B)} + \sum_v \langle m | \tilde{W} | v \rangle \chi_v^{(A,B)} = 0 \quad (3.26-a)$$

$$\sum_v \left\{ \left[\varepsilon_{m0}^A Y_A + \varepsilon_{m0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{\mu v} + \langle \mu | \tilde{W} | v \rangle \right\} \chi_v^{(A,B)} + \sum_l \langle \mu | \tilde{W} | l \rangle \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.26-b)$$

Burada zarf fonksiyonları üzerinde bir diferansiyel operatörü de içeren formda W yerine \tilde{W} yazılmıştır. Külçe yarıiletkenler için yapmış olduğumuz aynı tartışmaları burada da takip edebiliriz. l bantları v bantları ile yalnızca zayıf çiflenimli ise,

$$|\chi_l^{(A,B)}(z)\rangle \gg |\chi_v^{(A,B)}(z)\rangle \quad (3.27)$$

denklem (3.26-b) den

$$\chi_v^{(A,B)} \approx + \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{m0}^A Y_A - \varepsilon_{m0}^B Y_B} \sum_l \langle \mu | \tilde{W} | l \rangle \chi_l^{(A,B)} \quad (3.28)$$

elde edilir. Bu ifade denklem (3.26-a) yerine yazılırsa,

$$\sum_l \left\{ \left[\left[\varepsilon_{m0}^A Y_A + \varepsilon_{m0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \langle m | \tilde{W} | l \rangle \right] + \sum_v \frac{\langle m | \tilde{W} | v \rangle \langle v | \tilde{W} | l \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{m0}^A Y_A - \varepsilon_{m0}^B Y_B} \right\} \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.29)$$

elde edilir. Bu ifadeyi yeniden düzenlersek,

$$\sum_l \left\{ \left[\left[\varepsilon_{m0}^A Y_A + \varepsilon_{m0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \langle m | \tilde{W} | l \rangle \right] + \langle m | \tilde{W} \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_{m0}^A Y_A - \varepsilon_{m0}^B Y_B} \tilde{W} | l \rangle \right\} \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.30)$$

halini alır. Külçe yapıdaki tartışmamıza benzer olarak,

$$\tilde{\tilde{W}} = \tilde{W} + \tilde{W} \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_{v0}^A Y_A - \varepsilon_{v0}^B Y_B} \tilde{W} \quad (3.31)$$

tanımlayabiliriz. Bu tanımlamadan sonra külçe yapı için Luttinger-Kohn formalizasyonunun bütün çözümlerini hiçbir değişiklik yapmaksızın tekrarlayabiliriz. Bütün matris elemanlarında dalga vektörünün z bileşenini $k_z = i \frac{\partial}{\partial z}$ ile yer değiştirmeliyiz. Çiftlenimli denklemlerin en önemli özelliği Luttinger parametrelerinin

ve etkin kütlelerin konumdan bağımsız olmasıdır. Diyagonal olmayan matris elemanları için denk(3.25-a) kullanılır. Biz,

$$\frac{m_0}{M_{ml}^{\alpha,\beta}} = \frac{2}{m_0} \sum_v \frac{\langle m|p_\alpha|v\rangle\langle v|p_\beta|l\rangle}{(\bar{\epsilon} - \epsilon_{m0}^A Y_A - \epsilon_{m0}^B Y_B)} \quad (3.32)$$

tanımlarsak burada $\bar{\epsilon}$ külçe yapıda gördüğümüz kuvvetli çiftlenimli bantların ortalama enerjisidir. Ayrık bantların etkisi,

$$\tilde{W} - \tilde{W} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{M_{ml}^{zz}} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=x,y} k_\alpha \frac{1}{M_{ml}^{\alpha z}} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{M_{ml}^{z\alpha}} k_\alpha + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=x,y} k_\alpha \frac{1}{M_{ml}^{\alpha\beta}} k_\beta \quad (3.33)$$

olarak verilir.

$V(z)$ basamak türü potansiyel olduğunda kuyu ve potansiyel engeli ara yüzeyleri arasında sınır koşulları dikkatli kullanılmalıdır. Temel düşünce zarf fonksiyonu ve akı yoğunluğunun olasılığının heteroyapıda ara yüzeyden geçerken sürekliliğin korunmasıdır. Bu yüzden Hamiltonian'ın hermitienlik özelliğini sağlamak için tüm operatörleri aşağıdaki formda yazmalıyız.

$$A(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \frac{\partial}{\partial z} A(z) \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.34)$$

$$B(z) \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \frac{1}{2} \left[B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} B(z) \right] \quad (3.35)$$

Bu sonuçlarla iletim bandı için elde ettiğimiz dalga denklemi,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c^{A,B}} \frac{\partial}{\partial z} + V_c(z) + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_c^{A,B}} \right) \chi_c^{A,B} = \epsilon \chi_c^{A,B} \quad (3.36)$$

haline gelir.

3. 3. III-N-V YARIİLETKEN KUANTUM KUYULARININ BANT YAPISI

Kuantum kuyuları bir boyutlu kuşatılmış olan yapılardır ve bu yapılar farklı malzemeler ile lazer diyodlar gibi yeni optik aletlerin yapımında kullanılır. III-N-V kuantum kuyularında iletim ve valans bandının enerji band dağılımının ve dalga fonksiyonlarının hesaplanması genellikle çok karmaşıktır ve analitik çözümleri tam olarak yapılamamaktadır. Burada biz **k.p** metodu üzerine yoğunlaştık, bu metodla BAC yaklaşımı ve Luttinger-Kohn Hamiltonian ile birlikte çözüm üzerine çalıştık. Kuşatma doğrultusu z doğrultusu olan bir kuantum kuyusu çiftlenimli alt bantları için etkin kütle eşitliği,

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_B(z) \right) + \bar{H}_C(z) + U_{QW}(z) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \bar{g}(z, \vec{k}_t) \quad (3.36)$$

şeklinde yazılır. Burada

$$\bar{g}(z, \vec{k}_t) = \left. \begin{array}{c} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_C}(z) \end{array} \right\} N_C \text{ tane çiftlenimli bantların zarf fonksiyonudur.}$$

Çiftlenimli alt bantlar için elde edilen etkin kütle denklemleri iletim ve valans bantları için sırasıyla uygulayalım.

İletim bandı: $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ külçe yapısı için elde ettiğimiz 4x4'lük Hamiltoniyen matrisinden yararlanarak;

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} E_N & 0 & V_{NC} & 0 \\ 0 & E_N & 0 & V_{NC} \\ V_{NC} & 0 & E_C & 0 \\ 0 & V_{NC} & 0 & E_C \end{bmatrix} \begin{array}{l} |S_N \uparrow\rangle \\ |S_N \downarrow\rangle \\ |S \uparrow\rangle \\ |S \downarrow\rangle \end{array} \quad (3.37)$$

$\bar{\bar{H}}_A, \bar{\bar{H}}_B$ ve $\bar{\bar{H}}_C$

$$\bar{\bar{H}}_A(z) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m^*} \end{bmatrix}, \bar{\bar{H}}_B(z) = 0, \bar{\bar{H}}_C(z) = \begin{bmatrix} N & 0 & V_{NC} & 0 \\ 0 & N & 0 & V_{NC} \\ V_{NC} & 0 & \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) & 0 \\ 0 & V_{NC} & 0 & \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

biçiminde verilir. Kuşatma potansiyeli

$$U_{QW}(z) = \begin{cases} -\Delta E_C & |z| > \frac{L_w}{2} \\ 0 & |z| \leq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (3.39)$$

biçimindedir.

Valans bandı: $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ külçe yapısı için elde ettiğimiz 6x6'lık Hamiltoniyen matrisinden yararlanarak;

$$\bar{\bar{H}} = \begin{bmatrix} G - \varepsilon_0 & iH^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) & 0 & I & i\sqrt{\frac{3}{2}}H \\ -iH & F - \varepsilon_0 & \frac{i}{\sqrt{2}}H & -I & 0 & -\sqrt{2}I \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) & -\frac{i}{\sqrt{2}}H & \frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta & -i\sqrt{\frac{3}{2}}H & \sqrt{2}I & 0 \\ 0 & -I^* & i\sqrt{\frac{3}{2}}H^* & G - \varepsilon_0 & -iH & -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) \\ I^* & 0 & \sqrt{2}I^* & iH^* & F - \varepsilon_0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}H^* \\ -i\sqrt{\frac{3}{2}}H^* & -\sqrt{2}I^* & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) & \frac{i}{\sqrt{2}}H & \frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta \end{bmatrix} \begin{array}{l} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{array} \quad (3.40)$$

$\bar{\bar{H}}_A, \bar{\bar{H}}_B$ ve $\bar{\bar{H}}_C$

$$\bar{\bar{H}}_A = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} (\gamma_1^L + 2\gamma_2^L) & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2^L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\gamma_1^L - 2\gamma_2^L) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2\sqrt{2}\gamma_2^L & 0 & \gamma_1^L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\gamma_1^L + 2\gamma_2^L) & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2^L \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (\gamma_1^L - 2\gamma_2^L) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2^L & 0 & \gamma_1^L \end{bmatrix}$$

$$\bar{\bar{H}}_B = \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{m_0} \begin{bmatrix} 0 & i\gamma_3^L(k_x + ik_y) & 0 & 0 & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma_3^L(k_x - ik_y) \\ -i\gamma_3^L(k_x - ik_y) & 0 & \frac{i\gamma_3^L(k_x - ik_y)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i\gamma_3^L(k_x - ik_y)}{\sqrt{2}} & 0 & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma_3^L(k_x - ik_y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma_3^L(k_x + ik_y) & 0 & -i\gamma_3^L(k_x - ik_y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\gamma_3^L(k_x + ik_y) & 0 & \frac{i\gamma_3^L(k_x + ik_y)}{\sqrt{2}} \\ -i\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma_3^L(k_x + ik_y) & 0 & 0 & 0 & \frac{i\gamma_3^L(k_x - ik_y)}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\bar{\bar{H}}_C = \begin{bmatrix} -\varepsilon_0 & 0 & 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & -\varepsilon_0 & 0 & -I & 0 & -\sqrt{2}I \\ 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \Delta & 0 & \sqrt{2}I & 0 \\ 0 & -I^* & 0 & -\varepsilon_0 & 0 & 0 \\ I^* & 0 & \sqrt{2}I^* & 0 & -\varepsilon_0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}I^* & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \Delta \end{bmatrix}$$

(3.41)

biçiminde verilir. Burada $I(k) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}[\gamma_2^L(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3^L k_x k_y]$ dir.

Valans bandı süreksizliğine bağlı olarak tanımlanan kuşatma potansiyeli

$$U_{QW}(z) = \begin{cases} -\Delta E_v & |z| > \frac{L_w}{2} \\ 0 & |z| \leq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (3.42)$$

ile verilir.

Kuantum kuyularının iletim ve valans bantların yapısını belirlemek için elde edilen çiftlenimli diferansiyel denklem takımları FEM (Finite Element Method) kullanılarak sayısal olarak çözülebilir.

4. SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ

Sonlu Elemanlar Yöntemi (Finite Element Method, FEM) çok çeşitli fiziksel sistemlere ilişkin sayısal hesaplamalarda kullanılan bir yöntemdir[40]. Bir parçacıklı sistemin Hamiltonian'ı, $V(r)$ kuşatma potansiyeli olmak üzere,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (4.1)$$

biçiminde yazılabilir. Bu Hamiltonian ile yazılan Schrödinger denkleminde, uzunluklar Bohr yarıçapı, enerji de Rydberg enerjisi ile ölçülerek “boyutsuz” Hamiltonian

$$H = -\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (4.2)$$

biçiminde elde edilir. Bu durumda boyutsuz Hamiltonian ile Schrödinger denklemi

$$H\psi = \epsilon\psi \quad (4.3)$$

dir. Burada ilgilenilen fiziksel sistemi betimleyen dalga fonksiyonu, gerçek dalga fonksiyonu ise bu ifade geçerlidir. Yani, sayısal hesapta elde edilmek istenen dalga fonksiyonu gerçek değerine ne kadar yakınsa bu ifade de o kadar geçerli olur. Varyasyon ilkesindeki temel düşünceden hareketle elde edilmek istenen ve sistemi betimleyen dalga fonksiyonuna başlangıçta bir öneri yapılabilir.

$\psi \rightarrow u(\vec{r})$ (elde edilecek dalga fonksiyonu)

Yapılmak istenen, önerilen bu dalga fonksiyonları ile sistem için Schrödinger denklemini yazarak “minimizasyon ilkesi” gereği ilgili sistemin enerjisini minimum yapan dalga fonksiyonları ailesini elde etmektir. Önerilen yaklaşık dalga fonksiyonu ile Schrödinger denklemi

$$Hu = \epsilon u \quad (4.4)$$

biçimindedir. Sayısal hesaplamalar için ilgili çalışma uzayı bölmelendirilmelidir. Bu anlamda bölmelendirilmiş uzaydaki toplam düğüm noktası (nod) sayısı N , yine ilgili uzayı geren baz fonksiyonları $\Phi_n(\vec{r})$ olmak üzere, elde edilmek istenen dalga fonksiyonu;

$$u(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N u_n \Phi_n(\vec{r}) \quad (4.5)$$

biçiminde seriye açılarak yazılabilir. Yine elde edilmek istenen dalga fonksiyonunu ilgili uzaydaki nodlar üzerinden matris gösterimi

$$\bar{\Phi}^T = \{\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \dots, \Phi_N\} \quad (4.6)$$

$$\bar{u}^T = \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_N\} \quad (4.7)$$

biçimindedir. Böylelikle sistemde bulunması gereken N adet değişim parametresi u_N ‘‘Galerkin Yöntemi’’ ile elde edilebilir. Burada temel ilke, Schrödinger denklemini aranan $u(\vec{r})$ fonksiyonu ile yazmak, denklemi soldan fonksiyonun hermitik eşleniği ile çarpmak ve ilgili uzayda integral alarak sistemin değişim parametrelerinin minimum kılacağı ifadeyi oluşturmaktır. Yani, $u^\dagger = \bar{u}^\dagger \cdot \bar{\Phi}(\vec{r})$ olmak üzere,

$$G = \bar{u}^\dagger \cdot \left[\int_{\Omega} \bar{\Phi}(\vec{r}) (H - \varepsilon I) \bar{\Phi}^T(\vec{r}) d\tau \right] \bar{u} \quad (4.8)$$

burada I , $N \times N$ boyutlu birim matrisdir. Ayrıca $u(\vec{r})$, sisteme ilişkin tam çözüm ise $G = 0$, değilse $G \neq 0$ olacaktır. G 'yi minimum yapan (u, u^\dagger) ailesi enerjii de minimum yapacaktır. Aranan dalga fonksiyonu ve hermitik eşleniği yerine yazılırsa,

$$G = \bar{u}^\dagger \cdot \left[\int_{\Omega} \bar{\Phi}(\vec{r}) (H - \varepsilon I) \bar{\Phi}^T(\vec{r}) d\tau \right] \bar{u} \quad (4.9)$$

ve sembolik değişim yazılırsa,

$$\frac{\partial G}{\partial u^\dagger} = 0 \quad (4.10)$$

$$\left[\int_{\Omega} \bar{\Phi}(\bar{r})(H - \varepsilon I) \bar{\Phi}^T(\bar{r}) d\tau \right] \bar{u} = 0 \quad (4.11)$$

elde edilir. Burada Hamiltonian'ı açık olarak yazmadan önce kinetik terimin katkısına bakılmak istenirse, bu integralin

$$-\int_{\Omega} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla}^2 \cdot \bar{\Phi}^T d\tau = \int_{\Omega} \bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \cdot \bar{\Phi}^T d\tau - \int_{\Omega} \left(\bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \cdot \bar{\Phi}^T \right) d\tau$$

biçiminde yazılabileceği görülebilir. Bu ifadedeki ikinci terim ise, Stokes Teoremi ile bir yüzey integraline dönüştürülebilir.

$$-\int_{\Omega} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla}^2 \cdot \bar{\Phi}^T d\tau = \int_{\Omega} \bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \cdot \bar{\Phi}^T d\tau - \int_{\partial\Omega} \left(\bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \cdot \bar{\Phi}^T \right) \cdot d\bar{a}$$

İlgilenilen fiziksel sistemin çözüm uzayının yüzeylerinde aranılan dalga fonksiyonu ve eşleniklerinin sıfır olması gerekliliği, yani fiziksel sınır koşulları düşünüldüğünde, buradaki ikinci terimin kinetik terime katkısının olmayacağı görülebilir.

$$\bar{\Phi}_{\text{yüzey}} = 0 \quad (4.12)$$

Hamiltonian'ın açık biçimi, G nin değişimi ifadesiyle yazılırsa,

$$\left[\int_{\Omega} \left(\bar{\nabla} \bar{\Phi} \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T + \bar{\Phi} \mathbf{V}(\bar{r}) \bar{\Phi}^T \right) d\tau \right] \bar{u} = \varepsilon \left[\int_{\Omega} \bar{\Phi} \bar{\Phi}^T d\tau \right] \bar{u} \quad (4.13)$$

elde edilir. Bu ifade yeni bir gösterim ile,

$$\bar{\bar{K}} \cdot \bar{u} = \varepsilon \bar{\bar{M}} \cdot \bar{u} \quad (4.14)$$

biçiminde yazılabilir.

Literatürde,

$\overline{\overline{K}}$ → Esneklik matrisi

$\overline{\overline{M}}$ → Kütle matrisi

olarak isimlendirilir ve,

$$\overline{\overline{K}} = \int_{\Omega} \left[\overline{\nabla} \overline{\Phi} \overline{\nabla} \overline{\Phi}^T + \overline{\Phi} \mathbf{V}(\vec{r}) \overline{\Phi}^T \right] d\tau$$
$$\overline{\overline{M}} = \int_{\Omega} \overline{\Phi} \overline{\Phi}^T d\tau$$

dir. Çalışma uzayının tümü üzerinden olan integraller, bölmelendirilmiş uzay elemanları üzerinden olan integrallerin toplamı biçiminde yazılabilir;

$$\int_{\Omega} d\tau = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} d\tau \quad (4.15)$$

burada N_e , Global Element sayısıdır. O halde,

$$\overline{\overline{k}}_e = \int_{\Omega_e} \left[\overline{\nabla} \overline{\phi} \overline{\nabla} \overline{\phi}^T + \overline{\phi} \mathbf{V}(\vec{r}) \overline{\phi}^T \right] d\tau \Rightarrow \overline{\overline{K}} = \sum_{e=1}^{N_e} \overline{\overline{k}}_e \quad (4.16)$$

$$\overline{\overline{m}}_e = \int_{\Omega_e} \overline{\phi} \overline{\phi}^T d\tau \Rightarrow \overline{\overline{M}} = \sum_{e=1}^{N_e} \overline{\overline{m}}_e \quad (4.17)$$

olacaktır. Burada, $\overline{\phi}$ global eleman baz fonksiyonu, $\overline{\Phi}$ tüm uzayı geren baz fonksiyonudur. İlgilenilen sistemler için çözülmek istenen denklemleri, iyi ağ gözü üretimi ile birlikte, bu biçime getirdikten sonra çözümlerini sağlayan sayısal rutinler kullanılarak sonuca gitmek zor olmayacaktır.

4.1. Baz Fonksiyonları Seçimi

Fiziksel sistemlerin çözümüne ilişkin güçlü bir yöntem olan FEM’de yaklaşık çözüm sonlu boyuttaki fonksiyon uzayında aranır ve bu uzayın bir baz fonksiyon seti ile tanımlanabilir. N uzay boyutu olmak üzere

$$(\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_N) \quad (4.18)$$

dir. Baz fonksiyonları ile uzayın herhangi bir fonksiyon üyesi, bazların lineer bileşimi olarak gösterilebilir. Örneğin z_N elemanlarına sahip kesikli uzayda aranan yaklaşık çözüm

$$U(z) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(z) \quad (4.19)$$

dir. Burada, c_j , skaler bir sabittir. Sıklıkla çözüm uzayını geren baz fonksiyonları, polinomların kolay tanımlanması ve iyi bilinen özelliklerine sahip olması nedeniyle, sonlu boyuttaki polinom uzayı olarak seçilir. Bu durumda baz fonksiyonları polinomlardır ve n . Derece bir polinom uzayı için baz fonksiyonu olarak seçilecek polinomun mertebesi $N = n+1$ dir. Örnek olarak $\{1, z, z^2, \dots, z^N\}$ seçilebilir. Ancak herhangi bir lineer vektör uzayı olmadığı için tek bir temel set olmadığından baz fonksiyonların seçimi esnekliklidir. Polinom uzayı baz fonksiyonları içinde de ‘‘Lagrange Polinomları’’ baz fonksiyonları olarak seçilebilir. Lagrange polinomları çalışma uzayı Ω içindeki N tane düğüm noktasına (nod) göre $\{z_1, z_2, \dots, z_N\}$ tanımlanır. j nod indisi göstermek üzere $(N-1)$. derece polinom her z_j ile ilişkilidir.

Bir boyutta baz fonksiyonlarını yazmak için çalışma uzayı $[0,1]$ aralığında set edilebilir.

$$[z_a, z_b] \rightarrow [0,1]$$

Çözüm uzayında N tane nod olduğu düşünülürse, sistemde $(N-1)$ tane parça yer alacak

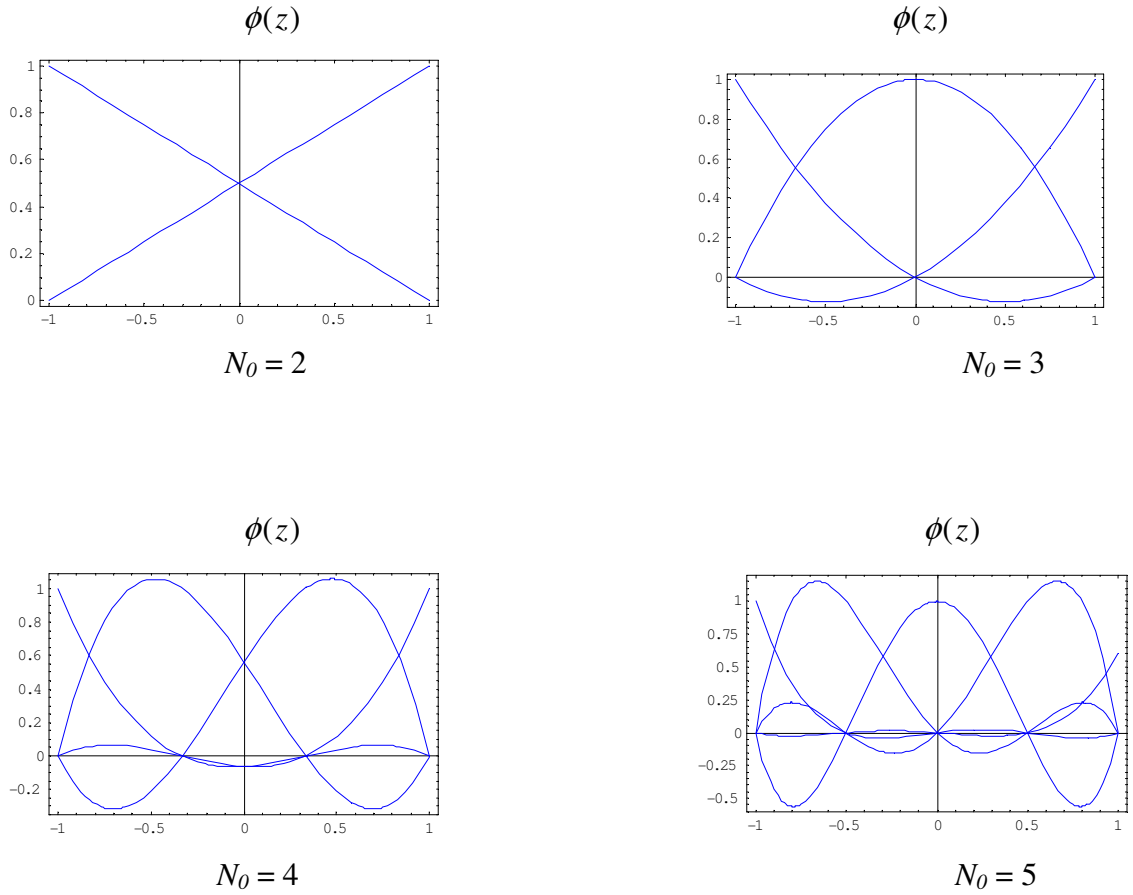
(Ω_j) ve bu parçaların her biri $\left(\frac{j-1}{N}, \frac{j}{N}\right)$ aralığında olur. Baz fonksiyonları z uzayında

ve $\hat{\Omega} = [-1,1]$ aralığında aranır. Uzaydaki nod sayısı N_0 olsun ($N_0 \geq 2$). Burada

oluşturulacak baz fonksiyonları N_0 tane olur ve z^{N_0-1} . dereceden polinomlardır. $\phi_i(z_j) = \delta_{ij}$ koşulunu sağlayan Lagrange Polinomların seçimi şöyle olabilir;

$$\phi_i(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} \quad (4.20)$$

Lagrange Polinomları yardımı ile z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonlar **Ek-4**' de ayrıntılı olarak hesaplanarak aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.



Şekil 4. 1 z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonları.

4. 2. FEM'in Çiftlenimli Bantlara Uygulanması

FEM'e geçmeden önce kullanacağımız notasyon hakkında biraz bilgi verebiliriz. Kare matrislerin, satır matrislerin ve sütun matrislerin çiftlenimli bantlar için kullanılan gösterimi ve nodlar için kullanılan gösterimi aşağıdaki gibidir.

	Matris	Sütun Matris	Satır Matris
	$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$	$(\cdot \quad \cdot \quad \cdot)$
Çiftlenimli bantlar için;	$\left(\overline{\quad} \right)$	$\left(\overline{\quad} \right)$	$\left(\overline{\quad}^{-T} \right)$
Nodlar için;	$\{ \{ \quad \} \}$	$\{ \quad \}$	$\{ \quad \}^T$

Kuantum kuyusu çiftlenimli alt bantları için etkin kütle denklemi \bar{g}^\dagger ile soldan çarpıp $[z_a, z_b]$ üzerinden integral alınırsa

Bu terimlerin integrali alınırsa.

$$\int_{z_a}^{z_b} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left(\underbrace{-\frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z}}_{\text{}} - \frac{i}{2} \left(\underbrace{\bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z}}_{\text{}} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_B(z) \right) + \bar{H}_C(z) + (U_{QW}(z) - E(\vec{k}_t)) \bar{I} \right) \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz = 0 \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned}
& \int_{z_a}^{z_b} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \bar{H}_C(z) + (U_{QW}(z) - E(\vec{k}_t)) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz \\
& + \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz \\
& - \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) \Big|_{z_a}^{z_b} = 0
\end{aligned} \tag{4.22}$$

$[g_1^* \ g_2^* \ \dots \ g_{N_C}^*]$

$N_C \times N_C$ matris

$N_C \times 1$ matris

arayüzey terimi

Bizim hesaplamalarımızda iletim bandı için $N_C = 4$, valans bandı için $N_C = 6$ olarak alınmıştır. Başlangıçta ara yüzey teriminin sıfıra eşit olduğu kabul edilir. Dolayısıyla

$$\begin{aligned}
& \int_{z_a}^{z_b} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \bar{H}_C(z) + (U_{QW}(z) - E(\vec{k}_t)) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz \\
& + \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz = 0
\end{aligned} \tag{4.23}$$

olur. $[z_a, z_b]$ aralığı N tane global elemente bölünür ve

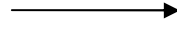
$$\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} dz \tag{4.24}$$

olur. Bu bilgilerin ışığında,

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \bar{H}_C(z) + (U_{QW}(z) - E(\vec{k}_t)) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz \\
& + \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz = 0
\end{aligned} \tag{4.25}$$

yazılabilir. Global element için aşağıdaki dönüşüm yapılırsa,

z_j * z_{j+1}



0 1

$$s = az + b \quad \text{ise}$$

$$1 = az_{j+1} + b$$

$$a = \frac{1}{z_{j+1} - z_j}$$

$$0 = az_j + b$$

$$b = \frac{z_j}{z_{j+1} - z_j}$$

Dolayısıyla,

$$s = \frac{z - z_j}{z_{j+1} - z_j} \quad L_j = z_{j+1} - z_j \quad \Rightarrow \quad ds = \frac{dz}{L_j}$$

şeklinde tanımlanan dönüşüm ile de,

$$\int_{z_j}^{z_{j+1}} dz = L_j \int_0^1 ds \quad \text{ve} \quad \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \frac{\partial s}{\partial z} \frac{\partial}{\partial s} = \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s}$$

$$\bar{g}_j(z)_{N_c \times 1} \rightarrow \bar{g}_j(s)_{N_c \times 1} \quad (\text{j. nci global element zarf fonksiyonu})$$

olur. Buradan

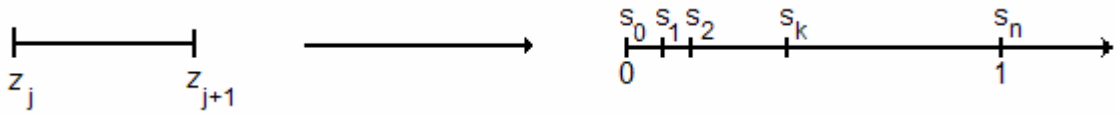
$$G = \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \bar{g}^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \bar{H}_C + (U_{QW} - E) \bar{I} \right] \bar{g}(s) ds$$

$$+ \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} \bar{g}^\dagger(s) \left[\bar{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \bar{H}_B \right] \bar{g}(s) ds = 0 \quad (4.26)$$

$$G = \sum_{j=0}^N \int_0^1 \bar{g}^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(\bar{H}_C + (U_{QW} - E) \bar{I} \right) \right] \bar{g}(s) ds$$

$$+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \bar{g}^\dagger(s) \left[\bar{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \bar{H}_B \right] \bar{g}(s) ds = 0 \quad (4.27)$$

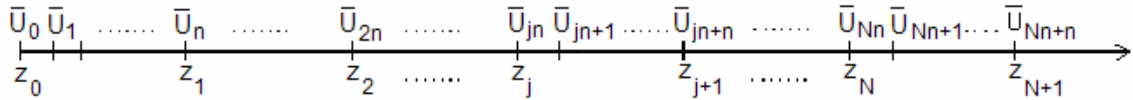
denklemi elde edilir. Yukarıdaki s dönüşümüyle geçilen $[0, 1]$ uzayında FEM bazları (ϕ 'lerin kümesi) oluşturulabilir. Bu uzayın (global elementin) n parçaya bölünmesiyle uzayda n. dereceden polinomla verilebilen (n+1) tane baz fonksiyonu oluşturulabilir.



Burada $s_0 = 0$ ve $s_n = 1$ dir. Baz fonksiyonları

$$\phi_i(s) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{(s - s_k)}{(s_i - s_k)} \quad (4.28)$$

ile tanımlıdır. Şekil 4. 2 den de görülebilirki, s uzayının n parçaya bölünmesi ile çözüm uzayının j .nci bölgesi de n parçaya bölünmüştür. Dolayısıyla, çözüm uzayında $(n.N+1)$ nokta olduğudur. Enerji özdeğer denkleminin çözümü olan fonksiyonun bu noktadaki değerleri \bar{U}_{jn+k} ile verilir.



Şekil 4. 2 Çiftlenimli bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması

Burada \bar{U}_{jn+k} , $N_C \times 1$ lik bir matristir. (Bizim hesaplamalarımızda \bar{U} iletkenlik bandı için 4×1 valans bandı için 6×1 'lik matrislerdir.)

$$\bar{U}_{jn+k} = \begin{bmatrix} U_{jn+k,1} \\ U_{jn+k,2} \\ \vdots \\ U_{jn+k,l} \\ \vdots \\ U_{jn+k,N_C} \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

Daha önce de belirtildiği gibi $U_0 = U_{Nn+n} = 0$ olmalıdır. $\bar{g}_j(s)$ fonksiyonları oluşturulan baz fonksiyonlarının lineer bileşimi olarak yazılabilir. Bu fonksiyonlar matris formunda yazılmak istenirse,

$$\bar{g}_j(s) = \bar{\phi}(s)^T \bar{U}_{jn+k} \quad (4.30)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}(s) \\ g_{j,2}(s) \\ \vdots \\ g_{j,l}(s) \\ \vdots \\ g_{j,N_C}(s) \end{bmatrix}_{N_C \times 1} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \times N_C \cdot n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times 1} \quad (4.31)$$

N_C tane sütun

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}(s) \\ g_{j,2}(s) \\ \vdots \\ g_{j,l}(s) \\ \vdots \\ g_{j,N_C}(s) \end{bmatrix}_{N_C \times 1} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \times N_C \cdot n} \begin{bmatrix} U_{jn+1,1} \\ U_{jn+1,2} \\ \vdots \\ U_{jn+1,N_C} \\ U_{jn+2,1} \\ U_{jn+2,2} \\ \vdots \\ U_{jn+2,N_C} \\ \vdots \\ U_{jn+n,1} \\ U_{jn+n,2} \\ \vdots \\ U_{jn+n,N_C} \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times 1} \quad (4.32)$$

N_C 'ye N_C 'inci eleman

Burada n , global elementteki node sayısını; N_C ise çiftlenimlibant sayısını ifade eder.

$$\bar{g}_j^\dagger(s) = \bar{U}_{jn+k}^\dagger \bar{\phi}(s) \quad (4.33)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}^*(s) & g_{j,2}^*(s) & \cdots & g_{j,l}^*(s) & \cdots & g_{j,N_C}^*(s) \end{bmatrix}_{1 \times N_C} = \begin{bmatrix} \bar{U}_{j+1}^\dagger & \bar{U}_{j+2}^\dagger & \cdots & \cdots & \bar{U}_{j+n}^\dagger \end{bmatrix}_{1 \times N_C^n} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \times n N_C} \quad (4.34)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}^*(s) & g_{j,2}^*(s) & \cdots & g_{j,l}^*(s) & \cdots & g_{j,N_C}^*(s) \end{bmatrix}_{1 \times N_C} = \begin{bmatrix} U_{j+1,1}^\dagger & U_{j+1,2}^\dagger & \cdots & U_{j+1,N_C}^\dagger & U_{j+2,1}^\dagger & \cdots & U_{j+2,N_C}^\dagger & \cdots & \cdots & U_{j+n,1}^\dagger & \cdots & U_{j+n,N_C}^\dagger \end{bmatrix}_{1 \times N_C^n} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \times n N_C} \quad (4.35)$$

şeklinde yazılabilir. Bu bilgiler kullanılarak üretici denklem

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \int_{\partial s} \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] & \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix} = \overline{AA} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds + \\
+ \sum_{j=0}^N \int_{\partial s} \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] & \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix} = \overline{BB} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds = 0
\end{aligned}
\tag{4.37}$$

olur. Burada

$$\overline{AA} = \left[-\frac{i}{2} \overline{H}_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(\overline{H}_C + (U_{QW} - E) \overline{I} \right) \right] \rightarrow N_C \times N_C \text{ 'lik bir matris}$$

$$\overline{BB} = \left[\overline{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \overline{H}_B \right] \rightarrow N_C \times N_C \text{ 'lik bir matris}$$

dir. Dolayısıyla,

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] \int_0^1 & \begin{bmatrix} \phi_1(s) \overline{AA} \phi_1(s) & \phi_1(s) \overline{AA} \phi_2(s) & \dots & \phi_1(s) \overline{AA} \phi_n(s) \\ \phi_2(s) \overline{AA} \phi_1(s) & \phi_2(s) \overline{AA} \phi_2(s) & \dots & \phi_2(s) \overline{AA} \phi_n(s) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_n(s) \overline{AA} \phi_1(s) & \phi_n(s) \overline{AA} \phi_2(s) & \dots & \phi_n(s) \overline{AA} \phi_n(s) \end{bmatrix} ds \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} + \\
\sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] \int_0^1 & \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) & \dots & \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_n(s) \\ \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) & \dots & \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_n(s) \end{bmatrix} ds \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} = 0
\end{aligned} \tag{4.38}$$

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] \underbrace{\int_0^1 \begin{bmatrix} \phi_1(s) \overline{AA} \phi_1(s) ds & \dots & \phi_1(s) \overline{AA} \phi_n(s) ds \\ 0 & \dots & 0 \\ \phi_2(s) \overline{AA} \phi_1(s) ds & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_n(s) \overline{AA} \phi_1(s) ds & \dots & \phi_n(s) \overline{AA} \phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\overline{O} \text{ dersek}} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} + \\
\sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] \underbrace{\int_0^1 \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) ds & \dots & \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_n(s) ds \\ 0 & \dots & 0 \\ \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) ds & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) ds & \dots & \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\overline{P} \text{ dersek}} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} = 0
\end{aligned} \tag{4.39}$$

\bar{O} matrisinin kk'inci elemanı

$$\begin{aligned} (\bar{O})_{kk} &= \int_0^1 \phi_k(s) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(\bar{H}_C + (U_{QW} - E) \bar{I} \right) \right] \phi_k(s) ds \\ &= -\frac{i}{2} \bar{H}_B \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + L_j \left(\bar{H}_C + U_{QW} \bar{I} \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds - L_j E \bar{I} \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (4.40)$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca \bar{P} matrisi için de

$$\begin{aligned} (\bar{P})_{kk} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \left[\bar{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \bar{H}_B \right] \phi_k(s) ds \\ &= \frac{\bar{H}_A}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{i}{2} \bar{H}_B \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (4.41)$$

yazılabilir. Dolayısıyla,

$$\begin{aligned} (\bar{O} + \bar{P})_{kk} &= \frac{\bar{H}_A^j}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{i}{2} \bar{H}_B^j \left(\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \right) \\ &+ L_j \left(\bar{H}_C^j + U_{QW}^j \bar{I} \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds - L_j E \bar{I} \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (4.42)$$

yazılabilir. Bu son eşitlik kullanılırsa,

$$G = \sum_{j=0}^N \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1}^\dagger & \bar{U}_{jn+2}^\dagger & \cdots & \cdots & \bar{U}_{jn+n}^\dagger \end{bmatrix}_{1 \times N_C \cdot n} (\bar{O} + \bar{P})_{N_C \cdot n \times N_C \cdot n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} = 0 \quad (4.43)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\bar{H}_A^j, \bar{H}_B^j, \bar{H}_C^j$ ve U_{QW}^j matrisleri z 'ye bağlıdır. Yani, j . nci materyaldeki özelliklerin (yarıiletkenin özellikleri) ve kuşatma potansiyelinin sabit olduğu kabul edilerek o global element için yazılan matrislerdir. \bar{O} ve \bar{P} için elde edilen son eşitlikler aşağıdaki tanımlarla

$$\begin{aligned}
\left(\bar{K}_1\right)_{kk} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \quad ; \quad \left(\bar{K}_2\right)_{kk} = \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \\
\left(\bar{M}_1\right)_{kk} &= \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds \\
\bar{O} + \bar{P} &= \underbrace{\frac{\bar{H}_A^j}{L_j} \bar{K}_1 + \frac{i}{2} \bar{H}_B^j \bar{K}_2 + L_j \left(\bar{H}_C^j + U_{QW}^j \bar{I} \right)}_{\bar{K}} \bar{M}_1 - \underbrace{EL_j}_{\bar{M}} \bar{M}_1 \\
\bar{O} + \bar{P} &= \bar{K} - E\bar{M}
\end{aligned} \tag{4.44}$$

şekline dönüştürülebilir. FEM denklemlerini bulmak için (“generating” denkleminin $U_{jn+k,l}^*$ ye göre türevi alınıp sıfıra eşitlenir.)

$$\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k,l}^*} = 0 \quad \left(\begin{array}{l} jn+k \quad 1, 2, \dots, n, n+1, n+2, \dots, 2n, 2n+1, \dots, jn, jn+1, \dots, jn+k, \dots, Nn+n-1 \\ l=1, 2, \dots, N_c \quad ; \quad k=1, 2, \dots, n \end{array} \right) \tag{4.45}$$

denklemini kullanılır. Dolayısıyla

$$G = \sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right]_{1 \times N_c \cdot n} \left(\bar{K} - E\bar{M} \right)_{N_c \cdot n \times N_c \cdot n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} = 0 \tag{4.46}$$

Burada $\overline{\overline{K}}, \overline{K}$ matrislerinin iç içe geçmesinden oluşan matristir, $\overline{\overline{M}}$ ise \overline{M} matrislerinin iç içe geçmesinden oluşan matristir.

5. Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK BANDI YAPISI

z doğrultusunda tanımlı bir kuantum kuyusu için iletim bandının enerji ve zarf fonksiyonları, $\vec{k}_t = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ ($k_x = k_t \cos \phi, k_y = k_t \sin \phi$) olmak üzere,

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_B(z) \right) + \bar{H}_C(z) + V_C(z) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \bar{g}(z, \vec{k}_t) \quad (5.1)$$

şeklinde verilen etkin kütle eşitliği çözülerek bulunabilir. Burada, $V_C(z)$

$$V_C(z) = \begin{cases} Q_C \Delta E_g, & z < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ Q_C \Delta E_g, & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (5.2)$$

ile verilir ve $Q_C = 0.80$ olarak alınmıştır. $\bar{g}(z, \vec{k}_t)$ N_C tane çiftlenimli bandın zarf fonksiyonudur (burada $N_C = 4$).

$$\bar{g}(z, \vec{k}_t) = \begin{bmatrix} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_C}(z) \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

Denklem (5.1) çiftlenimli diferansiyel denklemleri içerdiğinden Sonlu Elemanlar Yöntemi (Finite Element Method) kullanılarak çözülebilir. Yukarıdaki öz değer denklemini **Bölüm 3. 4**'de açık hali verilen Hamiltonian ve **Bölüm 4. 2**'de anlatılan yol izlenerek

$$G = \bar{U}^T (\bar{K} - E\bar{M}) \bar{U} \quad (5.4)$$

şeklinde üretici denklem elde edildi. Literatürde \bar{K} 'ya stiffnes matris, \bar{M} 'ye ise mass matris denmektedir. Doğru çözümü bulabilmek için

$$\frac{\partial G}{\partial \bar{U}^T} = 0 = \bar{K}\bar{U} - E\bar{M}\bar{U} \quad (5.5)$$

denklemini çözüldü. Bu bir özdeğer denklemidir ve buradaki özdeğer ve özfonksiyonlar bilinmemektedir. Yukarıdaki formulasyon $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun iletim bant yapısına uygulandı ve sonuçta elde edilen denklem MATLAB paket programı ile çözümlenerek kuantum kuyusunun özdeğer ve özfonksiyonları bulundu.

İnceleyeceğimiz yapıdaki $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ yarıiletkeni için materyal parametre değerleri, aşağıdaki ikili yarıiletken parametreleri arasındaki lineer ilişki kullanılarak elde edilmiştir.

$$P(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}) = xyP(\text{GaN}) + x(1-y)P(\text{GaAs}) + y(1-x)P(\text{InN}) + (1-x)(1-y)P(\text{InAs}) \quad (5.6)$$

hesaplamalarda kullanılan ikili yarıiletkenler için parametreler tablo 5. 1'de listelenmiştir.

Materyal	GaAs	InAs	GaN	InN
Örgü Sabiti a_0 (Å)	5.6533	6.0584	4.46	5.02
Enerji Aralığı E_g (eV)	1.519	0.417	3.299	1.94
Spin-Orbital Ayırımı Δ_s (eV)	0.34	0.41	0.011	0.006
Elastik Sıkışma C_{11} ($\times 10^{11} \text{ dyn / cm}^2$)	11.9	8.329	29.6	18.4
Elastik Sıkışma C_{12} ($\times 10^{11} \text{ dyn / cm}^2$)	5.38	4.526	15.4	11.6
Hidrostatik Basınç dE_g / dP ($\times 10^{-12} \text{ eVcm}^2 / \text{dyn}$)	11.3	10.2	32.0	22.0
Deformasyon Potansiyeli b (eV)	-1.7	-1.8	-2.67	-2.67
Elektron Etkin Kütlesi m_e (m_0)	0.067	0.022	0.15	0.14
Ağır Boşluk Etkin Kütlesi m_h (m_0)	0.350	0.333	0.855	0.833
Statik Dielektrik Sabiti κ	12.53	14.55	10.69	7.46

Tablo 5. 1 Hesaplamalarda kullanılan GaAs, InGa, GaN, InN materyal parametreleri [41–50].

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ külçesinin bant aralığı enerjisinin bileşenlere bağlılığı aşağıdaki formül kullanılarak hesaplanmıştır.

$$\begin{aligned}
 Eg(x, y) = & xyEg(\text{GaN}) + (1-x)yEg(\text{InN}) \\
 & + x(1-y)Eg(\text{GaAs}) + (1-x)(1-y)Eg(\text{InAs}) \\
 & + x(1-x)[yC_{\text{In-Ga}}(\text{InGaN}) + (1-y)C_{\text{In-Ga}}(\text{InGaAs})] \\
 & + y(1-y)[xC_{\text{As-N}}(\text{InNAs}) + (1-x)C_{\text{As-N}}(\text{GaNAs})]
 \end{aligned} \quad (5.7)$$

Burada $C_{A-B}(ABC)$ ABC malzemesinin bükülme parametreleridir. Bütün ilişkili bükülme parametreleri tablo 5. 2’de listelenmiştir.

$C_{\text{In-Ga}}(\text{InGaAs})$	$C_{\text{In-Ga}}(\text{InGaN})$	$C_{\text{As-N}}(\text{GaNAs})$	$C_{\text{As-N}}(\text{InNAs})$
1.4	0.51	20	4.22

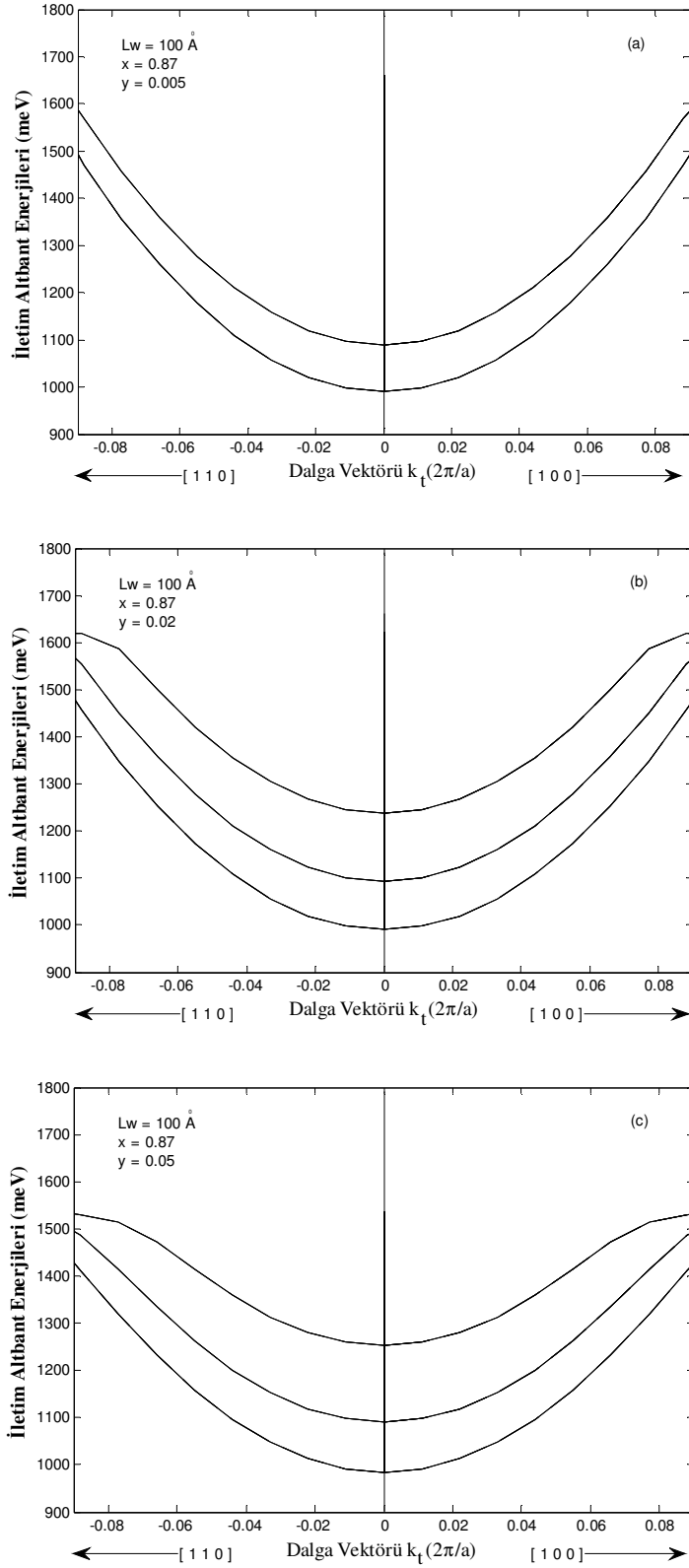
Tablo 5. 2 Hesaplalarda kullanılan bükülme (Bowing) parametreleri (eV) [51–54]

Şekil 5. 1 (a), (b) ve (c)’de $L = 100 \text{ \AA}$ ve $x = 0.87$ durumunda $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun iletim bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_i ’ye göre değişimi $y = 0.005$, $y = 0.02$ ve $y = 0.05$ konsantrasyonları için sırası ile verilmiştir. Azot konsantrasyonu artıkça bağlı durum enerji seviyeleri aşağı doğru kaymakta olduğu ve bağlı durum sayısının artmakta olduğu görülmektedir. Azot konsantrasyonunun $y = 0.005$, $y = 0.02$ ve $y = 0.05$ değerleri için elektronun etkin kütlelerini ($m_e = 0.0615878m_0$, $0.062901m_0$ ve $0.065527m_0$) ve kuantum kuyu potansiyeli $V_C = 258, 310$ ve 405 meV değerlerini alır. Elektronun etkin kütleesindeki artma kuantum kuyusundaki bağlı enerji düzeylerini aşağı doğru kaymasına neden olur. Buna karşın kuantum kuyu potansiyelinin artması bağlı durum enerji seviyelerinin yukarı doğru kaymasına sebep olacaktır. Burada elektronun kütle artışından dolayı enerji düzeylerindeki azalma, potansiyelin artmasından kaynaklanan artıştan daha baskın olduğu için kuantum kuyusundaki bağlı durum enerji seviyelerinin aşağı doğru kaymasına ve bağlı durum sayısının artmasına neden olacaktır.

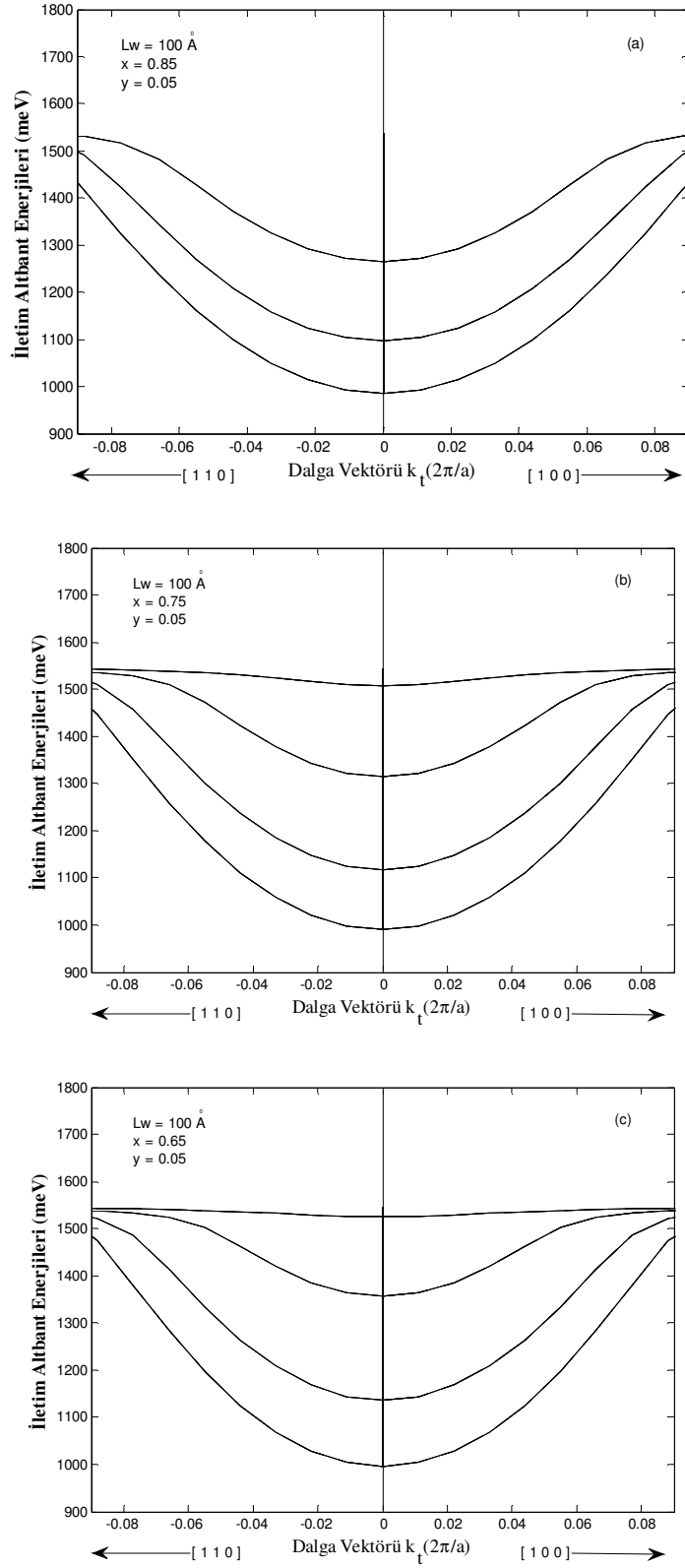
Şekil 5. 2 (a), (b) ve (c)’de $L = 100 \text{ \AA}$ ve $y = 0.05$ durumunda $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun iletim bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_i ’ye göre değişimi $x = 0.85$, $x = 0.75$ ve $x = 0.65$ konsantrasyonları için sırası ile verilmiştir.

İndiyum konsantrasyonu artıkça bağılı durum enerji seviyelerinin yukarı doğru kaymakta olduğu ve bağılı durum sayısının da artmakta olduğu görülmektedir. İndiyum konsantrasyonunun artması elektronun etkin kütlelerinin azalmasına ($m_e = 0.0646625m_0$, $0.0603375m_0$ ve $0.0560125m_0$) ve kuantum kuyu potansiyelinin artırmasına ($V_C = 451, 665$ ve 857 meV) neden olmaktadır. Elektronun etkin kütlesi ve kuantum kuyu potansiyelinin artması bağılı durum enerji düzeyleri yukarı doğru kaymasına neden olacaktır.

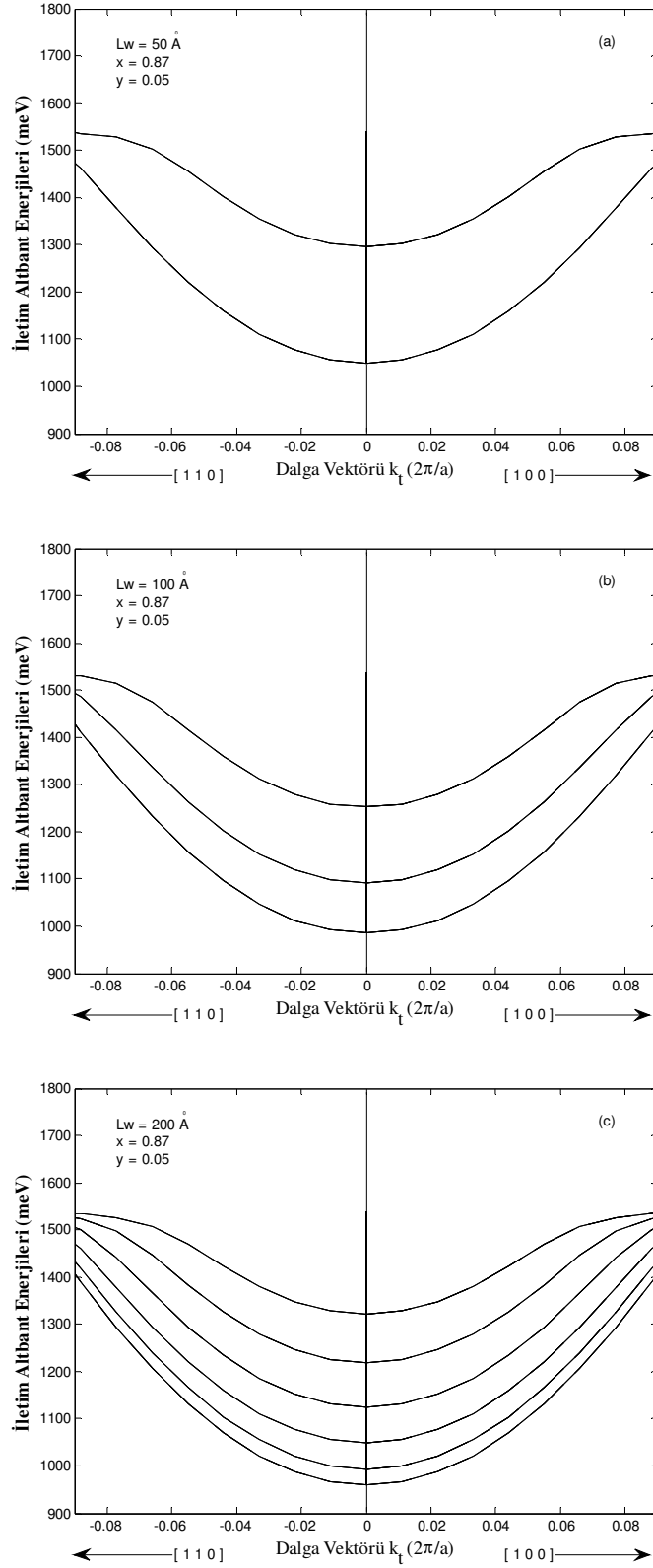
Şekil 5. 3 (a), (b) ve (c)'de $x = 0.87$ ve $y = 0.05$ durumunda $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusunun iletim bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_r 'ye göre değişimi $L = 50 \text{ \AA}$, $L = 100 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ kuyu genişlikler için sırası ile verilmiştir. Büyük L 'lere gidildikçe bağılı enerji düzeylerinin aşağı doğru kaydığı ve bağılı durum enerji sayısının artmakta olduğu görülmektedir. Kuyu genişliğinin artmasıyla kuşatma potansiyelin etkisi azalmaktadır. Bunun sonucu olarakta enerji seviyeleri azalmaktadır.



Şekil 5. 1 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.



Şekil 5. 2 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.



Şekil 5. 3 Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.

6. $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ KUANTUM KUYUSUNUN VALANS BANDI YAPISI

z doğrultusunda tanımlı bir kuantum kuyusu için valans bandının enerji ve zarf fonksiyonları, $\vec{k}_t = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ ($k_x = k_t \cos \phi, k_y = k_t \sin \phi$) olmak üzere,

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_B(z) \right) + \bar{H}_C(z) + V_h(z) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \bar{g}(z, \vec{k}_t) \quad (6.1)$$

şeklinde verilen etkin kütle eşitliği çözülerek bulunabilir. Burada, $V_h(z)$

$$V_h(z) = \begin{cases} Q_h \Delta E_g, & z < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \\ Q_h \Delta E_g, & z > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (6.2)$$

ile verilir ve $Q_h = 0.20$ olarak alınmıştır. $\bar{g}(z, \vec{k}_t)$ N_C tane çiftlenimli bandın zarf fonksiyonudur (Burada $N_C = 6$).

$$\bar{g}(z, \vec{k}_t) = \begin{bmatrix} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_C}(z) \end{bmatrix} \quad (6.3)$$

Denklem (6.1) çiftlenimli diferansiyel denklemleri içerdiğinden Sonlu Elemanlar Yöntemi (Finite Element Method) kullanılarak çözülebilir. Yukarıdaki özdeğer denklemi **Bölüm 3. 4'**te açık hali verilen Hamiltonian ve **Bölüm 4. 2'**de anlatılan yol izlenerek

$$G = \bar{U}^T (\bar{K} - E \bar{M}) \bar{U} \quad (6.4)$$

şeklinde üretici denklem elde edildi. Literatürde \bar{K} 'ya stiffnes matris, \bar{M} 'ye ise mass matris denmektedir. Doğru çözümü bulabilmek için

$$\frac{\partial G}{\partial U} = 0 = \overline{\overline{K}} \cdot \overline{\overline{U}} - \overline{\overline{E}} \cdot \overline{\overline{M}} \cdot \overline{\overline{U}} \quad (6.5)$$

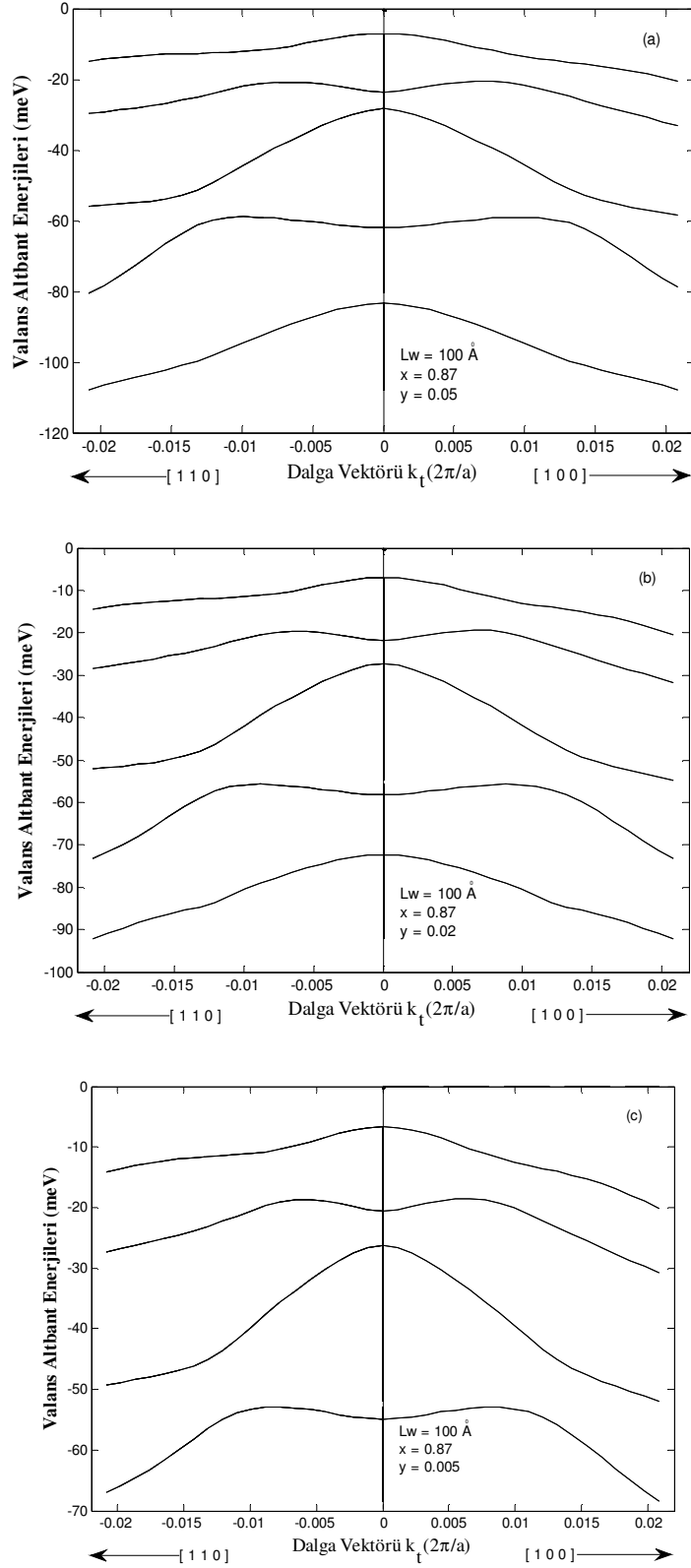
denklemleri çözüldü. Bu bir özdeğer denklemidir ve buradaki özdeğer ve özfonksiyonlar bilinmemektedir. Yukarıdaki formulasyon $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun valans bant yapısına uygulandı ve sonuçta elde edilen denklem MATLAB paket programı ile çözümlenerek kuantum kuyusunun özdeğer ve özfonksiyonları bulundu.

Şekil 6. 1 (a), (b) ve (c)'de $L = 100 \text{ \AA}$ ve $x = 0.87$ durumunda $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun valans bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_t 'ye göre değişimi $y = 0.05$, $y = 0.02$ ve $y = 0.005$ konsantrasyonları için sırası ile verilmiştir. Bağlı durum enerji seviyeleri azot konsantrasyonunun azalmasıyla yukarı doğru kaymaktadır (Örneğin $k_t = 0$ da taban durum enerjisi $y = 0.005$, $y = 0.02$ ve $y = 0.05$ konsantrasyonları için sırası ile 6.728, 7.025 ve 7.349 meV olarak artmaktadır). Azot konsantrasyonunun artması kuantum kuyusundaki kuşatma potansiyeli artırmaktadır. Buna bağlı olarak ta bağlı durum enerji düzeyleri daha enerjik olmaktadır.

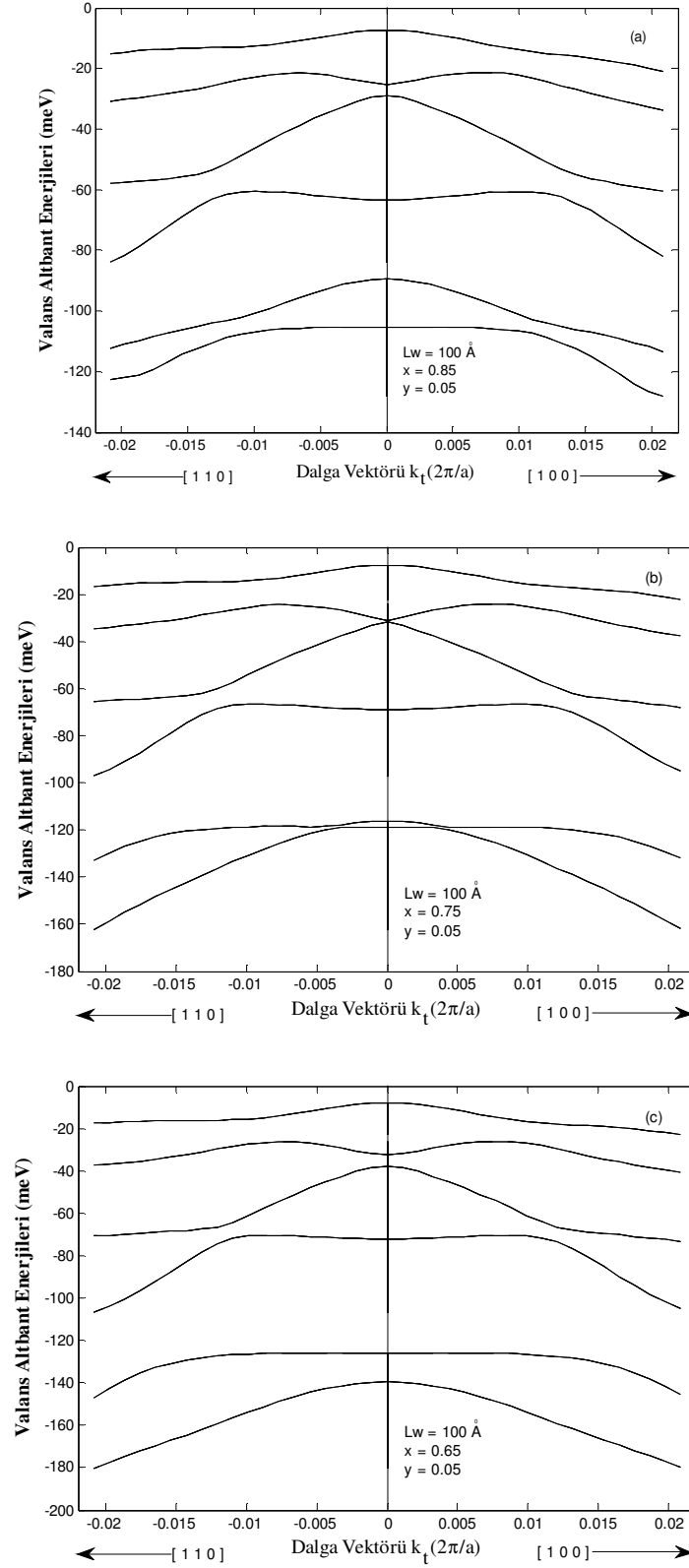
Şekil 6. 2 (a), (b) ve (c)'de $L = 100 \text{ \AA}$ ve $y = 0.05$ durumunda $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun valans bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_t 'ye göre değişimi $x = 0.85$, $x = 0.75$ ve $x = 0.65$ konsantrasyonları için sırası ile verilmiştir. İndiyum konsantrasyonunun artması ile bağlı durum enerji düzeyleri büyümektedir (Örneğin $k_t = 0$ da taban durum enerjisi $x = 0.85$, $x = 0.75$ ve $x = 0.65$ konsantrasyonları için sırası ile 7.524, 7.986 ve 8.201 meV olarak artmaktadır). İndiyum konsantrasyonunun artması kuşatma potansiyelini artırdığı için bağlı durum enerji düzeyleri büyümektedir.

Şekil 6. 3 (a), (b) ve (c)'de $x = 0.87$ ve $y = 0.05$ durumunda $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun valans bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_t 'ye göre değişimi $L = 50 \text{ \AA}$, $L = 100 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ kuyu genişlikleri için sırası ile verilmiştir. Büyük L değerlerine gidildikçe bağlı durum sayısının artmakta olduğu görülmektedir. Ayrıca büyük L değerlerine gidildikçe enerji düzeyleri yukarı doğru kaymakta olduğu görülmektedir. (Örneğin $k_t = 0$ da taban durum enerjisi $L = 50 \text{ \AA}$, $L = 100 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ kuyu genişlikleri için sırası ile 20.121, 6.967 ve 2.081 meV olarak azalmaktadır).

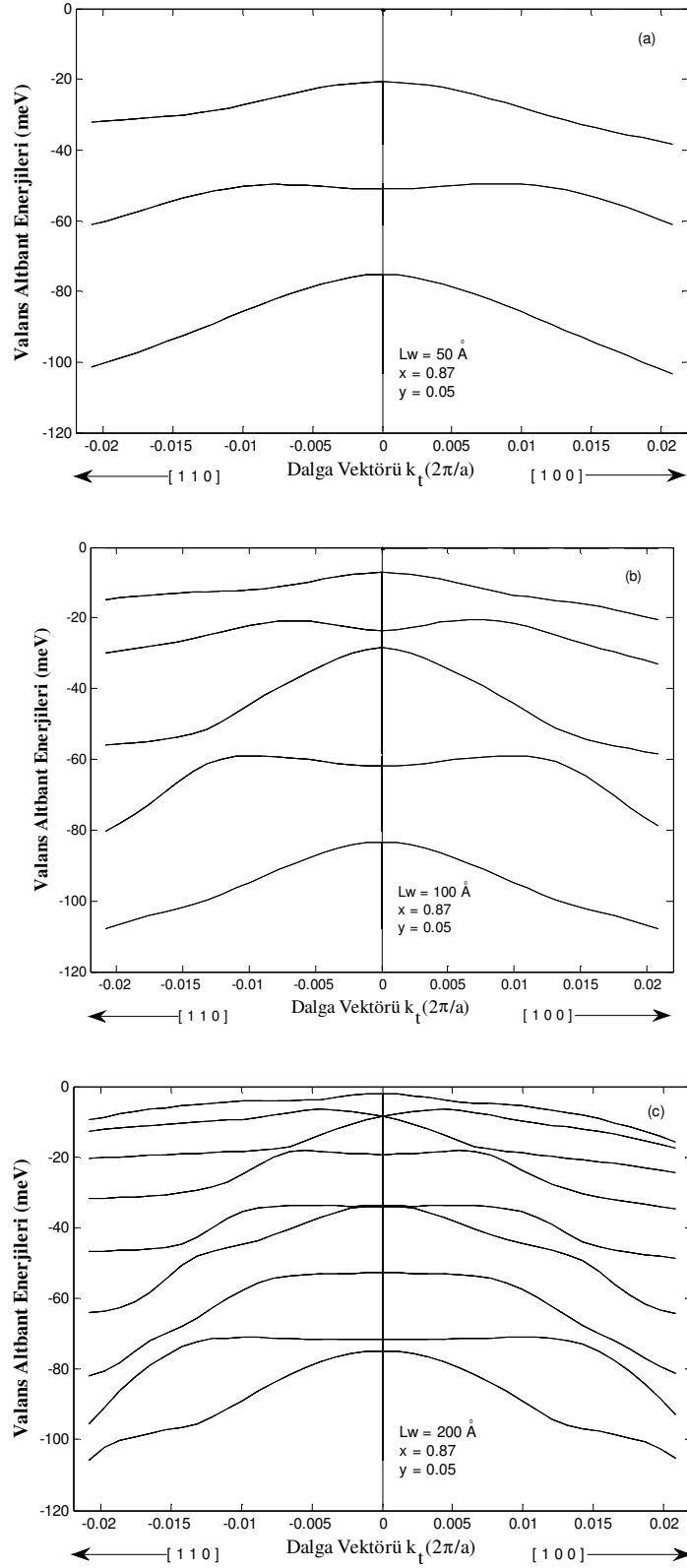
Bunun nedeni enerjinin kuyu genişliğine $\left(E \sim \frac{1}{L^2} \right)$ şeklinde bağlı olmasından kaynaklanmaktadır.



Şekil 6. 1 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.



Şekil 6. 2 Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.



Şekil 6. 3 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.

7. YOĞUN LAZER ALANI ALTINDA GaInNAs/GaAs KUANTUM KUYUSUNUN ELEKTRONİK YAPISI

Bir dış elektromanyetik (EM) alanın düşük boyutlu sistemlerin optiksel ve taşıma özellikleri üzerine olan etkisinin anlaşılması nanoelektronik gelişim için çok önemlidir. Bilindiği gibi, nanoyapılardaki kuşatılmış taşıyıcıların kuantum durumları bir elektrostatik (Franz-Keldish ve Stark-etkisi) veya bir manyetik alan (Shubnikov-de Haas osilasyonlar ve kuantum hal etkisi) uygulanması ile değiştirilebilir [55-56]. Son zamanlarda güçlü ayarlanabilir lazerlerin elde edilmesi, yarıiletken nanoyapılardaki taşıyıcılar ile yoğun lazer alanın (ILF) etkileşimi üzerindeki araştırma faaliyetlerini hızlandırmıştır[57]. Bu, dinamik Franz-Keldys etkisiyle kuantum kuyularında ve kuantum tellerindeki elektron durum yoğunluğunun (DOS) değişimi [58-60], mikrodalga ışınımı altındaki 2D elektron gazındaki sıfır direnç durumların ölçülmesi[61], yarıiletkendeki enerji bant aralıklarının değişmesi[62], optik soğurma spektrumunda güçlü bozulma[63] ve bunun gibi birçok fiziksel olayın açıklanmasına izin vermiştir.

Kuantum kuyularında, bağlı durumlar ve kuşatma potansiyeli üzerine yüksek frekanslı yoğun lazer alanın etkisi, bantlar arası (elektron-boşluk) ışımali birleşme, alt bantlar arası geçiş, hidrojenik safsızlık durumu, elektron durum yoğunluğu, rezonans tünelleme ve kuantum kuyu lazerlerinin ayarlanması gibi çalışmalar için önemli rol oynar. Heteroyapının ara yüzeyine dik doğrultuda polarize ve rezonans olmayan bir yoğun lazer alanı kare QW'daki kuşatılmış elektronlara ışınlandığında potansiyelde değişimler meydana gelir. Alan etkisi altında oluşan bu yeni potansiyele 'lazer etkili potansiyel' denir [64-66]. Potansiyeldeki bu değişimin hesabı yeterince yüksek frekanslar için Fourier-Floquet serisi açılımının sıfıncı mertebedeki terimi baskın olan pertürbatif olmayan Kramers-Henneberger (KH) öteleme değişimlerine dayanan yaklaşım kullanılarak hesaplanabilir. Lazer etkili potansiyel çözümleri için, birkaç basit analitik ifadeler önerilmiştir. Yapılan bu çalışmaların çoğunda lazer potansiyel için integral ifadeleri kolayca çözülebilen Ehlitzky tarafından önerilen yaklaşım kullanılmıştır.[67]. Ancak Kramers-Henneberger (KH) öteleme dönüşümünü temel alan pertürbatif olmayan yaklaşımla yapılan bazı son çalışmalar bu integralin analitik olarak çözülebileceğini göstermiştir [68-71]. Kuşatma potansiyelin biçimi hem lazer frekansı hem de lazer yoğunluğuna bağlı α_0 parametresinin artması ile tahmin edilenden daha fazla değişmektedir. Kuyu genişliği L olmak üzere bugüne kadar yapılan bütün

teorik alıřmalar yalnızca $\alpha_0 < L/2$ iin yapılmıřtır. Gnmz lazer teknolojisi ile on nanometreye kolayca ulařabilen lazer demetleri elde edilebildiđinden $\alpha_0 > L/2$ durumlarının arařtırılması ve btn bađlı durumlar iin enerji kaymasının sistematik bir incelemesi yapılabilir.

Bu alıřmada ilk olarak yksek frekanslar iin btn $\alpha_0 > 0$ deđerleri iin geerli lazer etkili potansiyel ifadesi kapalı formda sunulacak. İkinci kısımda lineer polarize rezonans olmayan ILF'nin GaInNAs/GaAs kuantum kuyusundaki elektronların ve bořlukların bađlı durumları ve kuyu potansiyeline etkileri incelenecektir.

7. 1. Yüksek frekans, yoğun lazer alanı altındaki bir kuantum kuyusundaki elektron

z doğrultusunda tanımlı bir kuantum kuyusunu z-ekseni boyunca lineer-polarize monokromatik EM alan ile ışınlandığı durumu ele alalım. EM alan ve kuantum kuyu potansiyel kuvvetlerinin etkisi altındaki elektronik durumlar Hamiltonian denkleminin kinetik kısmına dış EM alana karşılık gelen potansiyelin eklenmesi ile çalışılabilir. EM alanın klasik bir tasviri ile parçacık hareketinin kuantum tasvirinin birleşimi yarı klasik olarak zamana bağlı Schrödinger (SCD) denklemi,

$$\left\{ \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m^*} + V_b(z) \right\} \psi(z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} \quad (7.1)$$

ile verilir, burada $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ momentum operatörü ve $\vec{A} = \vec{A}(z, t)$ EM alan için vektör potansiyeldir. EM alan yüzey bölgesinde önemli bir fiziksel değişim meydana getirmediği için dipol yaklaşımı uygulanarak $\vec{A}(z, t) \approx \vec{A}(t)$ olarak alınır [72]. Coulomb ayarında, EM alan $\vec{F} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ şeklinde vektör potansiyeli ile ifade edilir. Her hangi bir $\vec{A}(t)$ osilasyonu için, denklem (7.1)'in sol tarafındaki Hamiltonian işlemcisindeki kinetik terimindeki zamana bağlılık KH birim dönüşüm ile potansiyel terime transfer edilir. KH dönüşümü $\varphi(z, t) = U^\dagger \Psi(z, t)$ ve $\tilde{H} = U^\dagger H U$ yapılarak elde edilir. Burada,

$$U = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{e}{m^*} \int \vec{A} \cdot \vec{p} dt + \frac{e^2}{2m^*} \int A^2 dt \right) \right] \quad (7.2)$$

KH dönüşüm operatörü ve H Hamiltoniandır. Bu dönüşümle zamana bağlı Schrödinger denklemi,

$$\left\{ \frac{p^2}{2m^*} + V_b[z + \alpha(t)] \right\} \varphi(z, t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(z, t)}{\partial t} \quad (7.3)$$

şekline dönüşür, burada $\alpha(t) = e/m^* \int^t A(t') dt'$ dir [74] . Kolaylık için t'ye harmonik bağlı bir monokromatik EM alan $\vec{A}(t) = A_0 \cos(\omega t) \hat{z}$ ele alalım. Burada $A_0 = F_0/\omega$, F_0 alan gerilimidir. Bu alanın şiddeti $\alpha_0 = eF_0/(m^* \omega^2 c)$ olmak üzere, $\alpha(t) = \alpha_0 \sin(\omega t)$ biçimindedir[76]. Bir EM alan varlığında elektron hareketini tanımlayan denklem (7.3) alan fazındaki dalgalanmaların Kramers çerçevesindeki $V_b(z + \alpha(t)) = V_0 \Theta(|z + \alpha_0 \sin(\omega t)| - l)$ potansiyeli ile etkileşen elektronların alternatif bir tanımı olabilir [77-78]. Bu periyodik potansiyel bir Fourier-Floquet serisine açılabilir ve yeterince yüksek frekanslar için sıfıncı mertebeye terimi daha baskındır[74-77]. Bu terim $1/T \int_0^T V_b[z + \alpha(t)] dt$ zaman ortalaması ile ilişkilidir. Burada $T = 2\pi/\omega$ radyasyon alanının periyodudur [59-66-78]. Bu ifade kare kuantum kuyu potansiyeli ile ilişkili lazer etkili potansiyel ifadesidir [79]. Lazer etkili potansiyel terimi analitik olarak çözümlenerek,

$$\langle V \rangle(z, \alpha_0) = \frac{1}{\pi} \int_{-\alpha_0}^{\alpha_0} \frac{V(z+y)}{\sqrt{\alpha_0^2 - y^2}} dy \quad (7.4)$$

şeklinde elde edilmiştir [79]. Burada $V(z+y) = V_0 \Theta(|z+y| - l)$ olmak üzere ve $\tilde{z} = z + y$ dönüşümü yapılarak

$$\langle V \rangle(z, \alpha_0) = \frac{V_0}{\pi} \int_{z-\alpha_0}^{z+\alpha_0} \frac{\Theta(|\tilde{z}| - l)}{\sqrt{\alpha_0^2 - (\tilde{z} - z)^2}} d\tilde{z} \quad (7.5)$$

elde edilir. Bu integral $|\tilde{z}| \geq l$ olan her yerde $\langle V \rangle(z, \alpha_0) = V_0$ dir. Buda potansiyel kuyusunun $|z| \geq l + \alpha_0$ noktalarında değişmediği anlamına gelir. Biz çalışmamızı $|z| < l + \alpha_0$ noktalarına sınırlandırarak, denklem (7.6) ile verilen lazer etkili potansiyeli

$$\langle V \rangle = \frac{V_0}{\pi} \left[\Theta(\alpha_0 - z - l) \int_{z-\alpha_0}^{-l} \frac{d\tilde{z}}{\sqrt{\alpha_0^2 - (\tilde{z} - z)^2}} + \Theta(\alpha_0 + z - l) \int_l^{z+\alpha_0} \frac{d\tilde{z}}{\sqrt{\alpha_0^2 - (\tilde{z} - z)^2}} \right] \quad (7.6)$$

şeklinde yazabiliriz. İntegral sabitinden başka, $\int dx / \sqrt{a^2 - x^2} = \arcsin(x/a)$ dönüşümü yapılarak denklem

$$\langle V \rangle(z; \alpha_0) = \frac{V_0}{\pi} \left\{ \Theta(\alpha_0 - z - l) \left[\frac{\pi}{2} - \arcsin\left(\frac{l+z}{\alpha_0}\right) \right] + \Theta(\alpha_0 + z - l) \left[\frac{\pi}{2} + \arcsin\left(\frac{z-l}{\alpha_0}\right) \right] \right\} \quad (7.7)$$

biçimine dönüşür. Sonuç olarak $|x| \leq 1$ aralığındaki bütün x değerleri için $\arcsin x + \operatorname{arccos} x = \pi/2$ eşitliği yardımıyla,

$$\langle V \rangle(z; \alpha_0) = \frac{V_0}{\pi} \left\{ \Theta(\alpha_0 - z - l) \operatorname{arccos}\left(\frac{l+z}{\alpha_0}\right) + \Theta(\alpha_0 + z - l) \operatorname{arccos}\left(\frac{l-z}{\alpha_0}\right) \right\} \quad (7.8)$$

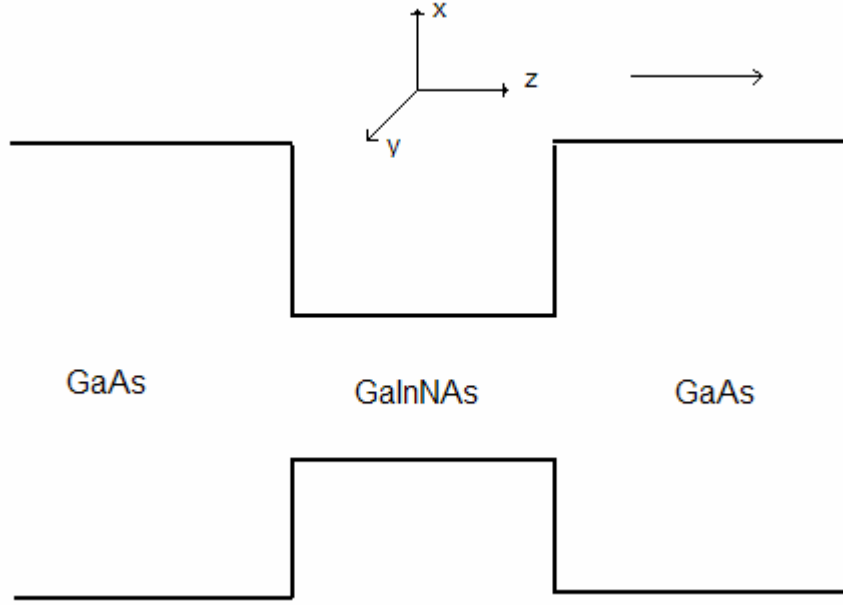
ana sonuca ulaşılır [80]. Sonuç olarak yoğun lazer alanı altındaki bir kuantum kuyusu için zamandan bağımsız Schrödinger (SCD) denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} + \langle V \rangle(z, \alpha_0) \varphi(z) = E_{KH} \varphi(z) \quad (7.9)$$

şeklinde yazılır. Burada E_{KH} yoğun lazer alanı altındaki enerji seviyeleridir.

7. 2. Yoğun Lazer Alanı Altındaki $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ Kuantum Kuyusunun Potansiyel Profilleri ve Altbant Enerjileri

Çalışmamızda potansiyel biçimi Şekil 7. 1 ile verilen $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli ve altbant yapısının üzerine z yönünde uygulanan yoğun lazer alanının etkisi incelenecektir.



Şekil 7. 1 Yoğun Lazer alan altındaki kuantum kuyusu potansiyel profili.

z doğrultusunda kuşatılmış ve +z doğrultusunda uygulanan yoğun lazer alan altındaki sistemin iletim ve valans bandı durumlarını ayrı ayrı inceleyeceğiz. İletim bandı ve valans bandı için Hamiltonian'ı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{e,h}^*} \frac{d^2}{dz_{e,h}^2} + V_{C,h}(z_{e,h}, \alpha_0) \quad (7.10)$$

şeklinde yazılır. Burada $V_C(z_e, \alpha_0)$ ve $V_h(z_h, \alpha_0)$ sırası ile elektron ve boşluk için lazer etkili potansiyel profilleridir. Lazer etkili potansiyellerin büyüklükleri de denklem (7.11)'deki gibi verilmektedir.

$$V_{C,h}(z_{e,h}, \alpha_0) = \frac{V_{C,h}(z_{e,h})}{\pi} \left\{ \Theta(|\alpha_0 - z_{e,h} - l|) \arccos\left(\frac{l + z_{e,h}}{\alpha_0}\right) + \Theta(|\alpha_0 + z_{e,h} - l|) \arccos\left(\frac{l - z_{e,h}}{\alpha_0}\right) \right\} \quad (7.11)$$

Burada $V_{C,h}(z_{e,h})$ z doğrultusundaki elektron ve boşluk için kuşatma potansiyelidir, Θ basamak fonksiyonudur. $V_{C,h}(z_{e,h})$ kuşatma potansiyelleri

$$V_{C,h}(z_{e,h}) = \begin{cases} Q_{C,h} \Delta E g & , \quad z_{e,h} < -\frac{Lw}{2} \\ 0 & , \quad -\frac{Lw}{2} \leq z_{e,h} \leq \frac{Lw}{2} \\ Q_{C,h} \Delta E g & , \quad z_{e,h} > \frac{Lw}{2} \end{cases} \quad (7.12)$$

biçiminde verilir. Hamiltonian'deki tüm uzunluklar Bohr yarıçapı ($a_B = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$) ve tüm enerji terimleri Rydberg ($Ryd = \frac{\mu e^4}{2\epsilon_0^2 \hbar^2}$) cinsinden yazılarak Hamiltonian boyutsuz hale getirilebilir.

$$\tilde{H} = -\frac{\mu}{m_{e,h}^*} \frac{d^2}{d\tilde{z}_{e,h}^2} + \tilde{V}_{C,h}(\tilde{z}_{e,h}, \tilde{\alpha}_0) \quad (7.13)$$

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusu için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H}\psi(\tilde{z}_{e,h}) = \tilde{E}\psi(\tilde{z}_{e,h}) \quad (7.14)$$

biçiminde yazılır. Sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu, genişliği $L_b = 2L$ olan sonsuz potansiyel kuyusunun öz fonksiyonlarından oluşan çözümleri baz olarak kullanılarak oluşturulmuştur. Sözü edilen bazlar genel formda,

$$\varphi_n(\tilde{z}_{e,h}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos \left[\frac{n\pi}{L_b} \tilde{z}_{e,h} - \delta_n \right] \quad (7.15)$$

biçimindedir. Burada δ_n , L_b genişliğindeki sonsuz kuantum kuyusunun öz fonksiyonlarındaki tek ve çift özdeğerlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere,

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - \text{tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n - \text{çift ise} \end{cases} \quad (7.16)$$

değerlerini alır. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\psi(\tilde{z}_{e,h}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z}_{e,h}) \quad (7.17)$$

biçimindedir. Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri,

$$\tilde{E} = \langle \psi | -\frac{\mu}{m_{e,h}^*} \frac{d^2}{d\tilde{z}_{e,h}^2} + \tilde{V}_{C,h}(\tilde{z}_{e,h}, \tilde{\alpha}_0) | \psi \rangle \quad (7.18)$$

biçiminde elde edilir. Yukarıdaki anlatılan yaklaşımlar sonucunda elde edilen analitik denklemler bilgisayar programları yardımıyla çözülmüş ve $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusuna z yönünde uygulanan yoğun lazer alanının kuşatma potansiyeli ve alt-bant enerjilerine etkisi incelenmiştir.

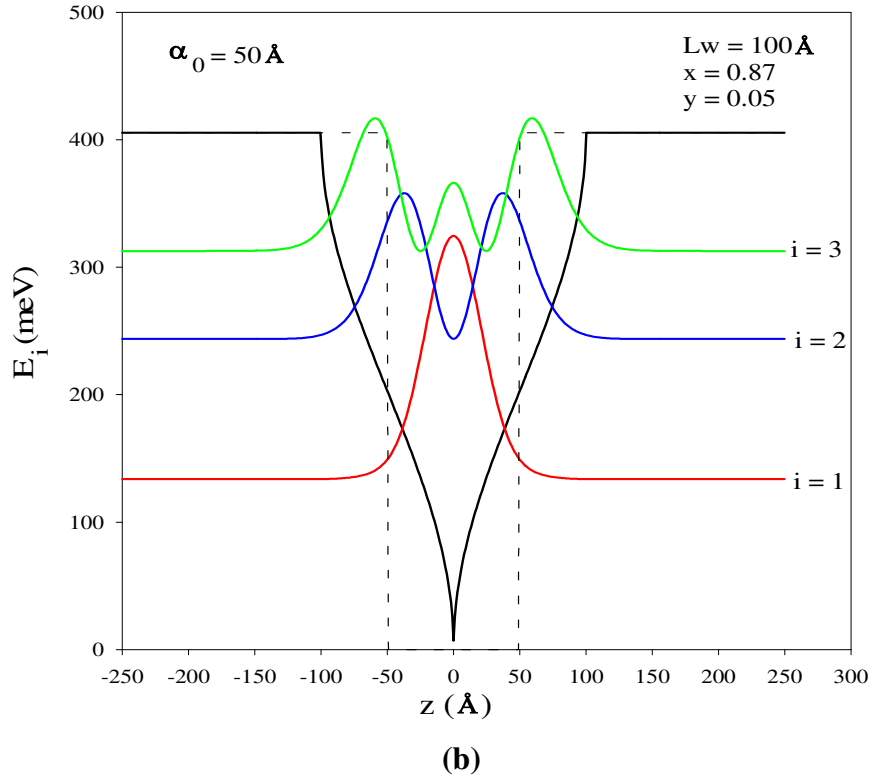
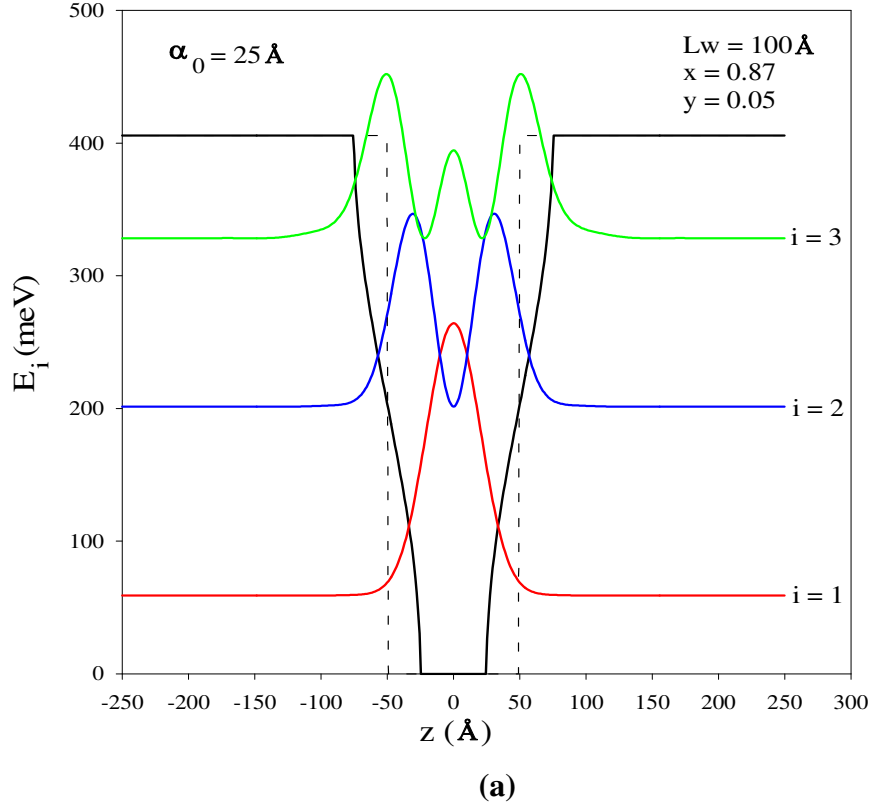
Çalışmamızda $x = 0.87$, $y = 0.05$ ve $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk bir $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusu seçtik. Bu parametrelerde elektron ve boşluk için kuşatma potansiyelleri sırası ile $V_C = 405.703 \text{ meV}$ ve $V_h = 101.426 \text{ meV}$ dir. Dış alan yok iken bu kuantum kuyusunda iletim bandı için üç bağlı durum (37.23, 145.63 ve 310.61 meV) ve valans bandı için de dört bağlı durum (6.99, 27.57, 60.33 ve 98.21 meV) bulunmaktadır. Bu kuantum kuyusuna bir yoğun lazer alanı uygulandığında, potansiyel profilinin değiştiği ve bunun sonucunda bağlı durum enerji seviyelerinin belirgin bir şekilde değiştiği görülmüştür.

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, iletim alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin konumuna göre değişimi $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$ ve $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$ için sırası ile şekil 7. 2’de verilmiştir. Lazer alanının $0 \leq \alpha_0 \leq L/2$ değerleri için kuantum kuyusunun alt kısmı $L - 2\alpha_0$ ve üst kısmı ise $L + 2\alpha_0$ genişliklerine dönüşürler. α_0 ’ın $\alpha_0 = L/2$ kadar artması ile elde edilen belirgin enerji kaymalarının nedeni; $V_C/2$ den küçük enerjili durumlar etkin kuyu genişliğini L kuyu genişliğinden daha küçük etkin kuyu genişliği hisseder, böylece enerjiler maviye kayar. Diğer yandan $V_C/2$ den büyük enerjili durumlar ise etkin kuyu genişliğini L ’den daha büyük etkin kuyu genişliği hisseder ve bundan dolayı da enerjiler kırmızıya kayar.

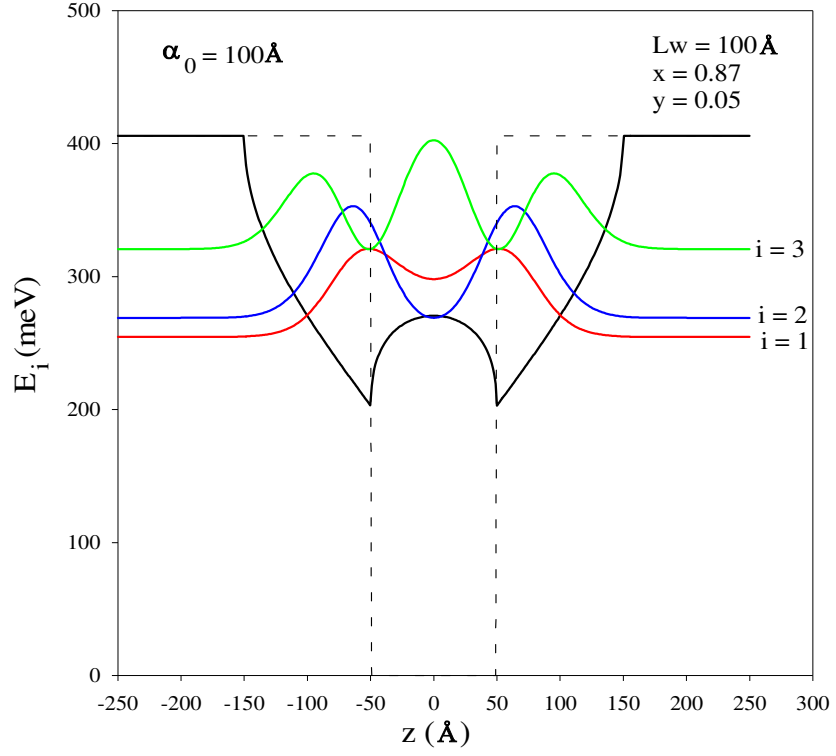
Şekil 7. 3 de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, iletim alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin konumuna göre değişimi $\alpha_0 = 100 \text{ \AA}$ ve $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$ için sırası ile verilmiştir. $\alpha_0 > L/2$ olduğu rejim durumu çok karmaşıktır. Şekil 7. 3’de görüldüğü gibi, arccos fonksiyonların üst üste binmesiyle kuyu içinde $z = -\alpha_0 + L/2$ ve $z = \alpha_0 - L/2$ arasında tepe şeklinde simetrik bir bariyer oluşmaktadır. Tepenin genişliği $2\alpha_0 - L$ olmak üzere α_0 ile lineer olarak artmaktadır. Tepenin en üst noktası daima kuyunun merkezinde lokalize olur ($z = 0$ ’da) ve buradaki potansiyel değeri $V_{top}(\alpha_0) = 2V_C / \pi \times \arccos(L/2\alpha_0)$ dir. En alt kısmı ise $z = -\alpha_0 + L/2$ ve $z = \alpha_0 - L/2$ noktalarındadır, buradaki potansiyel değeri $V_C / \pi \times \arccos(L/\alpha_0 - 1)$ dir ve dış alan etkisinde olmayan kuantum kuyusunun en alt potansiyel değerinden daima daha yukarıdadır. Yukarıdaki ifadelerden kolayca görülebileceği gibi çok büyük α_0 sınırlarında potansiyelin en alt ve en üst noktaları V_C değerine gitmektedir ve bu sınırlarda bağlı durum enerji seviyeleri de V_C değerine yaklaşacağı sonucunu çıkarabiliriz. Ayrıca şekil 7. 3’de görüldüğü gibi taban durum dalga fonksiyonu α_0 artması ile bir pikli durumdan iki pikli dalga fonksiyonuna dönüşmektedir. Büyük α_0 ’larda sistem artık çift kuyu gibi davranmaya başlayarak engelin tepe yüksekliğinin artması ile iki kuyu arasındaki etkileşim azalır ve alt bantlara ait enerji seviyeleri birbirine yaklaşır.

Şekil 7. 4 ve şekil 7. 5 de $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, valans alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin konumuna göre değişimi verilmiştir. Lazer alanı ile potansiyel profilinin ve enerji durumlarındaki değişimler iletim bandında anlatılan değişimler ile aynıdır.

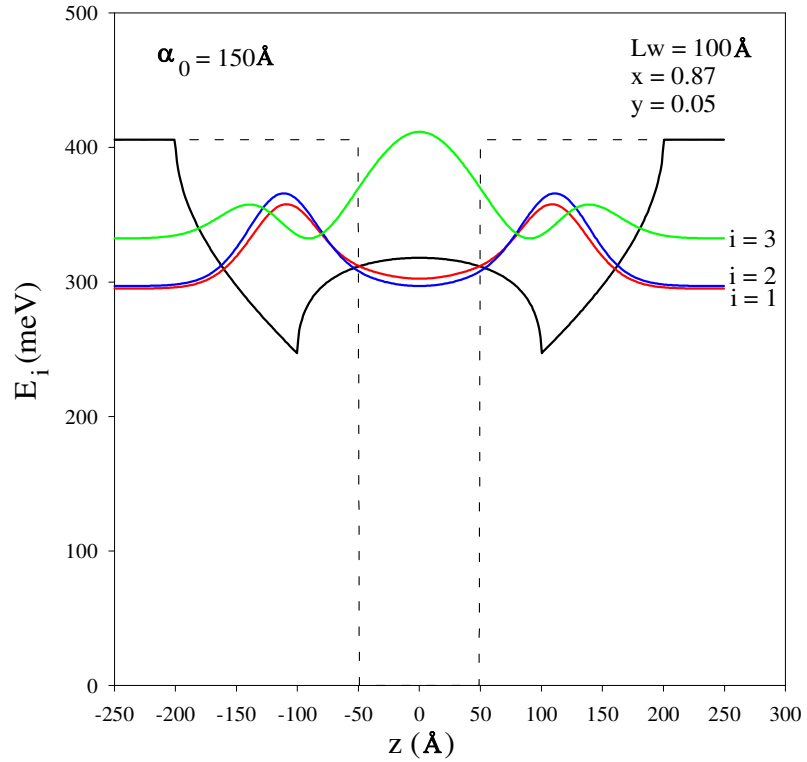
Şekil 7. 6 (a) ve (b)'de $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusunun bağlı durum enerji seviyelerinin α_0 ile değişimi iletim ve valans bandı için sırası ile verilmiştir. a) İletim bandı için en düşük iki enerji seviyesi (E_0 ve E_1) α_0 artması ile maviye kaymaktadır. Üçüncü enerji seviyesi (E_2) α_0 artması ile önce maviye kaymakta $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$ da maksimuma ulaştıktan sonra kırmızıya kaymaktadır ve $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$ da minimum yaparak tekrardan maviye kaymaktadır. α_0 artıkça yeni bağlı durumlar oluşmaktadır ve bu bağlı durumlar α_0 artmasıyla kırmızıya kaymaktadır. Çok büyük α_0 gidildikçe E_0 ve E_1 enerji seviyelerinin birleşmekte olduğu görülmektedir. b) Valans bandı bağlı durum enerji seviyelerinin α_0 ile değişimi, iletim bandındaki değişime benzer davranışlar göstermektedir. Sonuç olarak; gözlenen bu davranışların bantlar arası geçişlere dayalı sistemler üzerinde yapılacak olan deneysel çalışmalara katkı sağlayacak nitelikte olduğu söylenebilir.



Şekil 7. 2 $x = 0.87$, $y = 0.05$ ve $L = 100 \text{ \AA}$ için $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, iletim alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$.

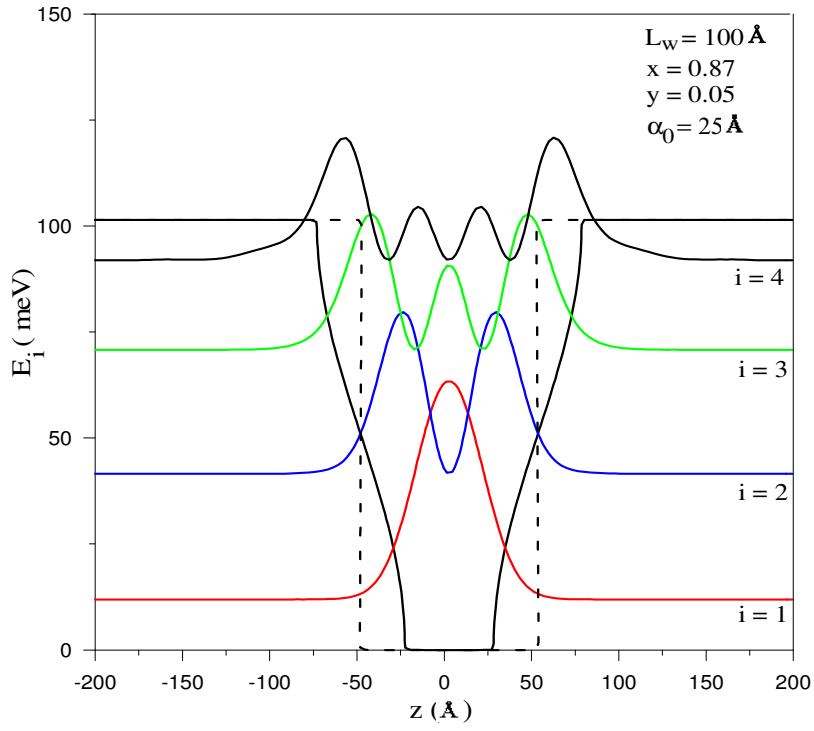


(a)

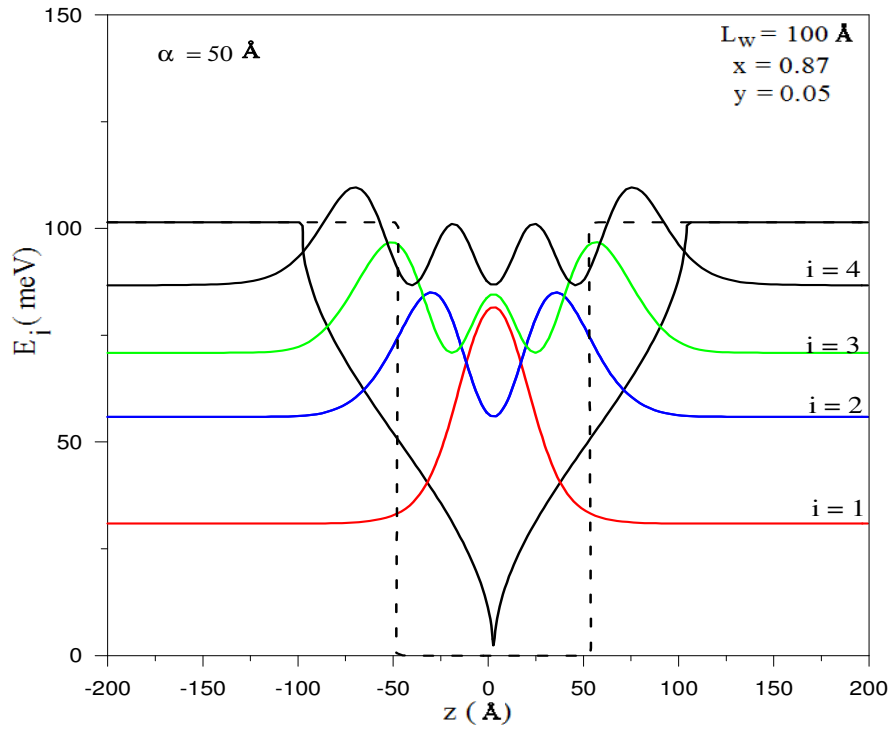


(b)

Şekil 7.3 $x = 0.87$, $y = 0.05$ ve $L = 100 \text{ \AA}$ için $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, iletim alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\alpha_0 = 100 \text{ \AA}$, (b) $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$.

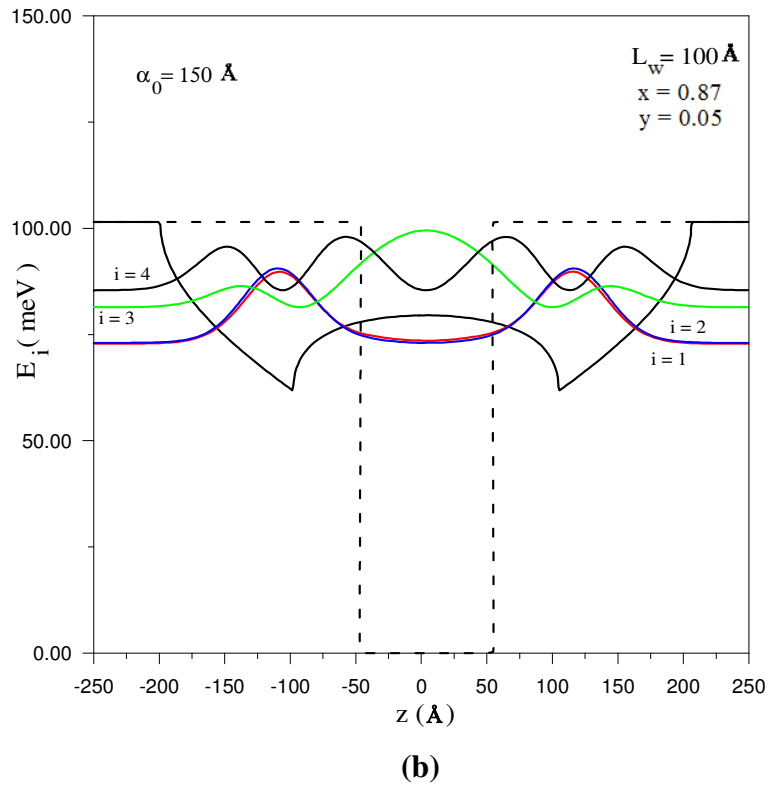
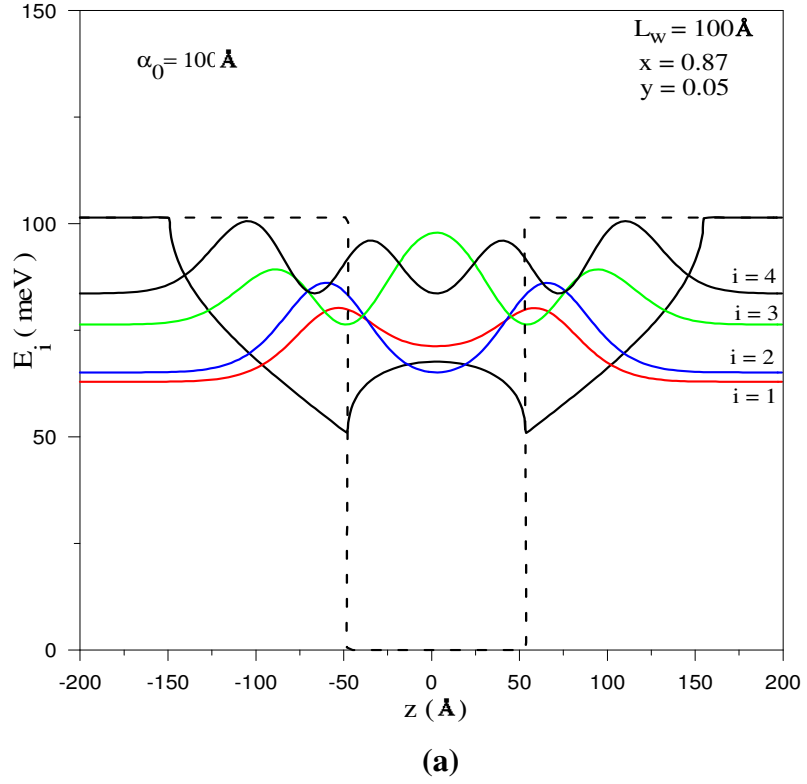


(a)

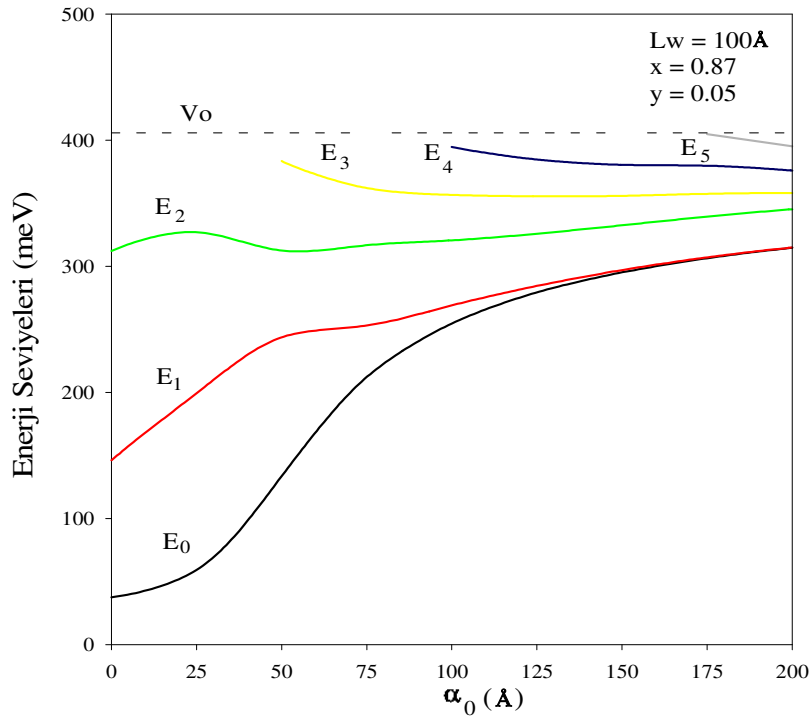


(b)

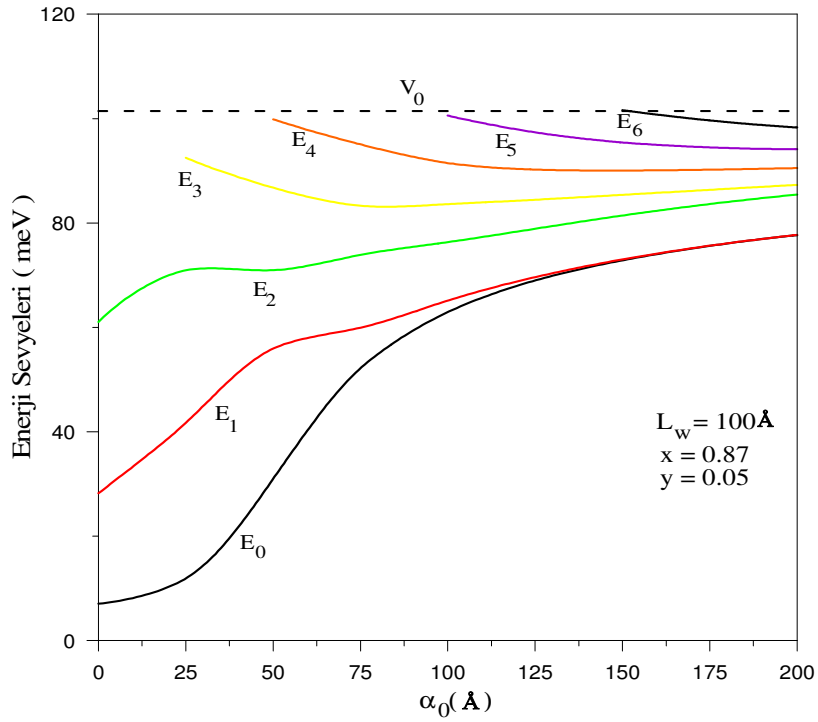
Şekil 7.4 $x = 0.87$, $y = 0.05$ ve $L = 100 \text{ \AA}$ için $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, valans alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$.



Şekil 7. 5 $x = 0.87$, $y = 0.05$ ve $L = 100 \text{ \AA}$ için $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, valans alt bant enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $\alpha_0 = 100 \text{ \AA}$, (b) $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$.



(a)

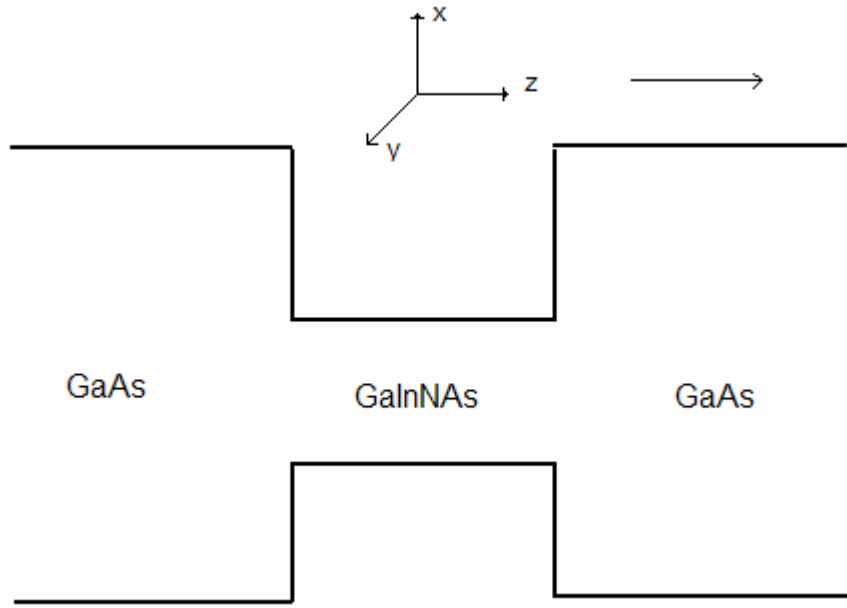


(b)

Şekil 7. 6 $x = 0.87$, $y = 0.05$ ve $L = 100 \text{ \AA}$ için $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunun (a) iletim ve (b) valans bant enerjilerinin lazer alan göre değişimi.

8. YOĞUN LAZER ALAN ALTINDA GaInNAs/GaAs KUANTUM KUYUSUNDA EKZİTONİK YAPI

Çalışmamızın bu aşamasında potansiyel profili şekil 8.1 ile verilen GaInNAs/GaAs kuantum kuyusundaki, yük taşıyıcıların davranışları ve oluşturdukları eksitonik yapının bağlanma enerjisinin z yönünde uygulanan yoğun lazer alana, N ve In konsantrasyonuna ve z doğrultusundaki kuantum kuyu genişliğine (L) bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir.



Şekil 8. 1 Yoğun Lazer alan altındaki kuantum kuyusu potansiyel profili.

z doğrultusunda kuşatılmış ve +z doğrultusunda uygulanan yoğun lazer alan altındaki elektron-boşluk sistemi için Hamiltonian'ı

$$H = \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h + \alpha_0 \hat{z}|} + \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h - \alpha_0 \hat{z}|} \right) + V_c(z_e, \alpha_0) + V_h(z_h, \alpha_0) \quad (8.1)$$

biçiminde verilir. ϵ_0 dielektrik sabiti $V_C(z_e, \alpha_0)$ ve $V_h(z_h, \alpha_0)$ sırası ile elektron ve boşluk için lazer etkili potansiyel profilleridir. Lazer etkili potansiyellerin büyüklükleri de aşağıdaki gibidir.

$$V_{C,h}(z_{e,h}, \alpha_0) = \frac{V_{C,h}(z_{e,h})}{\pi} \left\{ \Theta(|\alpha_0 - z_{e,h} - l|) \arccos\left(\frac{l + z_{e,h}}{\alpha_0}\right) + \Theta(|\alpha_0 + z_{e,h} - l|) \arccos\left(\frac{l - z_{e,h}}{\alpha_0}\right) \right\} \quad (8.2)$$

Burada $V_{C,h}(z_{e,h})$ z doğrultusundaki elektron ve boşluk için kuşatma potansiyelidir, Θ basamak fonksiyonudur.

$\vec{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ olmak üzere denklem (8.1) yeniden düzenlersek

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial r_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial r_h^2} - \frac{e^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h + \alpha_0 \hat{z}|} + \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h - \alpha_0 \hat{z}|} \right) + V_C(z_e, \alpha_0) + V_h(z_h, \alpha_0) \quad (8.3)$$

elde edilir. Coulombik terim sadece elektron-boşluk bağıl koordinatlarına etkidiği için (\vec{r}_e, \vec{r}_h) koordinatları yerine bağıl koordinat ve kütle merkezi koordinatları tanımlamak uygundur. $H(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \rightarrow H(\vec{r}, \vec{R})$ dönüşümü yapılarak iki parçacık problemini tek parçacık problemine indirgeyebiliriz. $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$ bağıl koordinat ve $\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_h \vec{r}_h}{m_e + m_h}$ kütle merkezi koordinatı olmak üzere gerekli dönüşümleri yaparak Hamiltonian'ı aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{m_e}{(m_e + m_h)^2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_h} \left[\frac{m_h}{(m_e + m_h)^2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \right] - \frac{e^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{1}{|\vec{r} + \alpha_0 \hat{z}|} + \frac{1}{|\vec{r} - \alpha_0 \hat{z}|} \right) + V_C(z_e, \alpha_0) + V_h(z_h, \alpha_0) \quad (8.4)$$

Burada kütle merkezi hareketini sabit alırsak Hamiltonian,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} - \frac{e^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{1}{|\vec{r} + \alpha_0 \hat{z}|} + \frac{1}{|\vec{r} - \alpha_0 \hat{z}|} \right) + V_C(z_e, \alpha_0) + V_h(z_h, \alpha_0) \quad (8.5)$$

şeklinde elde edilir ve burada μ ($\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$) indirgenmiş kütlelerdir.

$x = \rho \cos \phi, y = \rho \sin \phi$ dönüşümü yapılarak silindirik koordinatlardaki Hamiltonian ifadesi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{e^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h + \alpha_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h - \alpha_0)^2}} \right) + V_C(z_e, \alpha_0) + V_h(z_h, \alpha_0) \quad (8.6)$$

olarak elde edilir. Burada $\rho = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2}$, (x-y) düzlemindeki elektron-boşluk arasındaki bağıl uzaklıktır. Hamiltonian'deki tüm uzunluklar Bohr yarıçapı ($a_B = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$) ve tüm enerji terimleri ($Ryd = \frac{\mu e^4}{2\epsilon_0^2 \hbar^2}$) cinsinden yazılarak Hamiltonian

$$\tilde{H} = -\left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\mu}{m_e} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_e^2} - \frac{\mu}{m_h} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_h^2} - \left(\frac{1}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}_e - \tilde{z}_h + \tilde{\alpha}_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}_e - \tilde{z}_h - \tilde{\alpha}_0)^2}} \right) + V_C(\tilde{z}_e, \tilde{\alpha}_0) + V_h(\tilde{z}_h, \tilde{\alpha}_0) \quad (8.7)$$

biçiminde boyutsuz hale getirilebilir. Ayrıca Hamiltonian

$$\tilde{H} = \tilde{H}_e + \tilde{H}_h + \tilde{H}_{ex} \quad (8.8)$$

biçiminde kısımlara ayrılabilir. Denklem (8.8)'deki terimler

$$\begin{aligned} \tilde{H}_e &= -\frac{\mu}{m_e} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_e^2} + V_C(\tilde{z}_e; \alpha_0) \\ \tilde{H}_h &= -\frac{\mu}{m_h} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_h^2} + V_h(\tilde{z}_h; \alpha_0) \\ \tilde{H}_{ex} &= -\left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{1}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}_e - \tilde{z}_h + \tilde{\alpha}_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}_e - \tilde{z}_h - \tilde{\alpha}_0)^2}} \end{aligned}$$

biçimindedir. Elektron-boşluk sistemi için Schrödinger denklemi

$$\tilde{H}\Phi(\tilde{z}_e, \tilde{z}_h, \tilde{\rho}, \alpha, \beta) = \tilde{E}\Phi(\tilde{z}_e, \tilde{z}_h, \tilde{\rho}, \alpha, \beta) \quad (8.9)$$

biçiminde yazılabilir. Sistemi tanımlayan genel dalga fonksiyonu

$$\Phi(\tilde{z}_e, \tilde{z}_h, \tilde{\rho}, \alpha, \beta) = \psi_e(\tilde{z}_e)\psi_h(\tilde{z}_h)g(\tilde{\rho}, \tilde{z}_e, \tilde{z}_h, \alpha, \beta) \quad (8.10)$$

ile verilir. $\psi_e(\tilde{z}_e)$ ve $\psi_h(\tilde{z}_h)$ elektron ve boşluğun z doğrultusundaki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonlarıdır. Sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu, genişliği $L_b = 2L$ olan sonsuz potansiyel kuyusunun öz fonksiyonlarından oluşan çözümleri baz olarak kullanılarak oluşturulmuştur. Sözü edilen bazlar genel formda,

$$\varphi_n(\tilde{z}_{e,h}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos\left[\frac{n\pi}{L_b} \tilde{z}_{e,h} - \delta_n\right] \quad (8.11)$$

biçimindedir. Burada δ_n , L_b genişliğindeki sonsuz kuantum kuyusunun öz fonksiyonlarındaki tek ve çift özdeğerlere karşılık gelen faz farkı olmak üzere,

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - \text{tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n - \text{çift ise} \end{cases} \quad (8.12)$$

değerlerini alır. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\psi(\tilde{z}_{e,h}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z}_{e,h}) \quad (8.13)$$

biçimindedir. İncelediğimiz yapıda x ve y eksenini doğrultusunda kuşatma olmadığı için parçacıklar bu doğrultuda sadece Coulombic etkileşme etkisindedir. Yük taşıyıcılarının bu özelliği sonucu hidrojen atomu yapısına benzer bir durum ortaya çıkar. Bu nedenle

bu doğrultudaki hareketi tanımlamak için hidrojen tipi atomları tanımlayan Gaussian tip orbital dalga fonksiyonu kullanılmıştır. Bu dalga fonksiyonu

$$g(\tilde{\rho}, \tilde{z}_e, \tilde{z}_h, \alpha, \beta) = N \exp\left[-\sqrt{\frac{\tilde{\rho}^2}{\alpha^2} + \frac{(\tilde{z}_e - \tilde{z}_h)^2}{\beta^2}}\right] \quad (8.14)$$

formundadır. Burada N normalizasyon sabitidir α ve β varyasyon parametrelerdir. İstenilen farklı fiziksel durumlar için ekzitonik yapının enerji özdeğerleri varyasyon parametrelerinin enerjisi minimize ettiği uygun değerleriyle

$$\min_{\alpha, \beta} \langle \Phi | \tilde{H} | \Phi \rangle = \tilde{E} \quad (8.15)$$

eşitliğinden elde edilir. Taban durumunda bulunan ekzitonun bağlanma enerjisi ise boyutsuz olarak

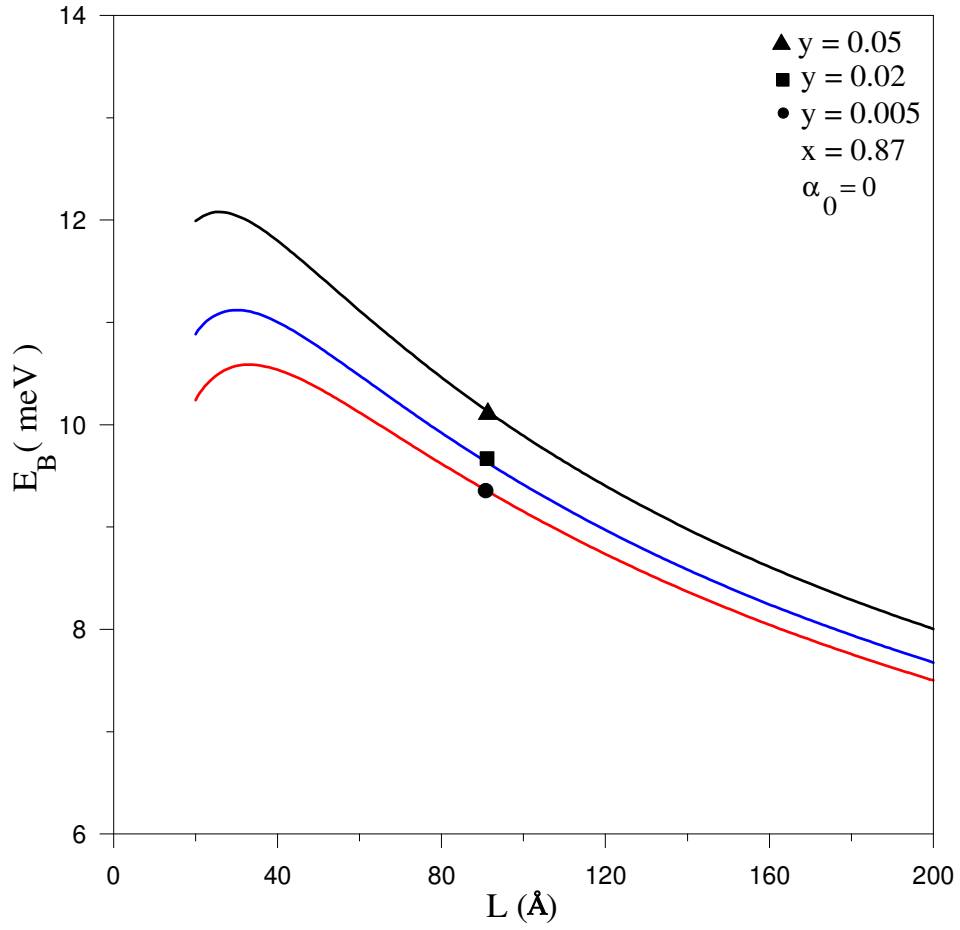
$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_z^e + \tilde{E}_z^h - \langle \tilde{H} \rangle \quad (8.16)$$

ile verilir. Burada $\tilde{E}_z^e, \tilde{E}_z^h$ sırasıyla elektron ve boşluğun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjileridir. Denklem(8.16)'teki integral nümerik olarak hesaplanmıştır.

Tez çalışmamızda, incelediğimiz GaInNAs/GaAs kuantum kuyu sisteminin ayarlanabilir parametreleri değiştirilerek elektron ve boşluğun taban durum enerji seviyeleri ve denklem(8.16)'in yardımıyla ekziton bağlanma enerjisi hesaplanmıştır.

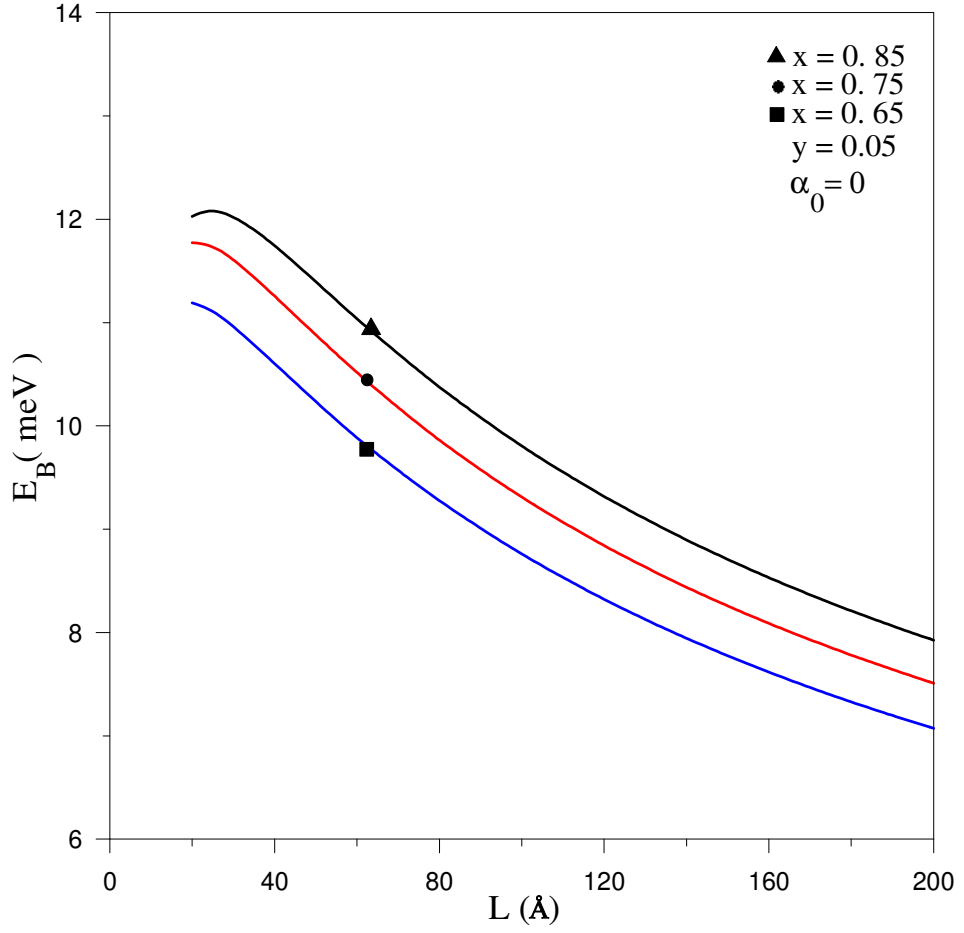
Şekil 8. 2'de yoğun lazer alanı olmadığı durumda $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusundaki farklı azot konsantrasyonları için eksiton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Kuyu genişliği-L arttıkça, bağlanma enerjisi bir maksimuma ulaşıncaya kadar artar ve sonra azalmaya başlar. Bağlanma enerjisinin maksimum olduğu L değerleri için sistem yarı-iki boyutlu karaktere sahiptir ve

elektron-boşluk çiftinin aynı düzlemde bulunma olasılığı fazladır. Çok büyük L değerlerinde ise, büyütme doğrultusundaki kuşatma azalır ve bağlanma enerjisi üç-boyutlu sistemdeki değerine yaklaşır. Bu nedenle geniş kuyularda elektron ve boşluğun aynı düzlemde bulunma olasılığı çok küçüktür. Ayrıca çok küçük L değerlerinde parçacıklar (elektron ve boşluk) çok enerjik olduklarından potansiyel engellerine sızmaları artar ve sistem çok büyük L değerlerinde olduğu gibi yeniden üç-boyutlu karaktere sahip olur. Bundan dolayı da çok küçük L değerleri için bağlanma enerjisi azalacaktır. Şekil 8. 2' de görüldüğü gibi azot konsantrasyonunun artmasıyla ekziton bağlanma enerjisinin arttığı görülmektedir. Azot konsantrasyonunun artması ile sistemin kuşatma potansiyeli ve kuantum kuyusundaki ekzitonun indirgenmiş kütlesi artmakta buna karşın dielektrik sabiti azalmaktadır. Kuşatma potansiyelindeki artma ve kuantum kuyusundaki ekzitonun indirgenmiş kütesinin artması elektron-boşluk çiftinin kuyu içerisinde daha iyi lokalize olmasını ve bu nedenle de ekziton bağlanma enerjisinin artmasına neden olacaktır.



Şekil 8. 2 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı azot konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

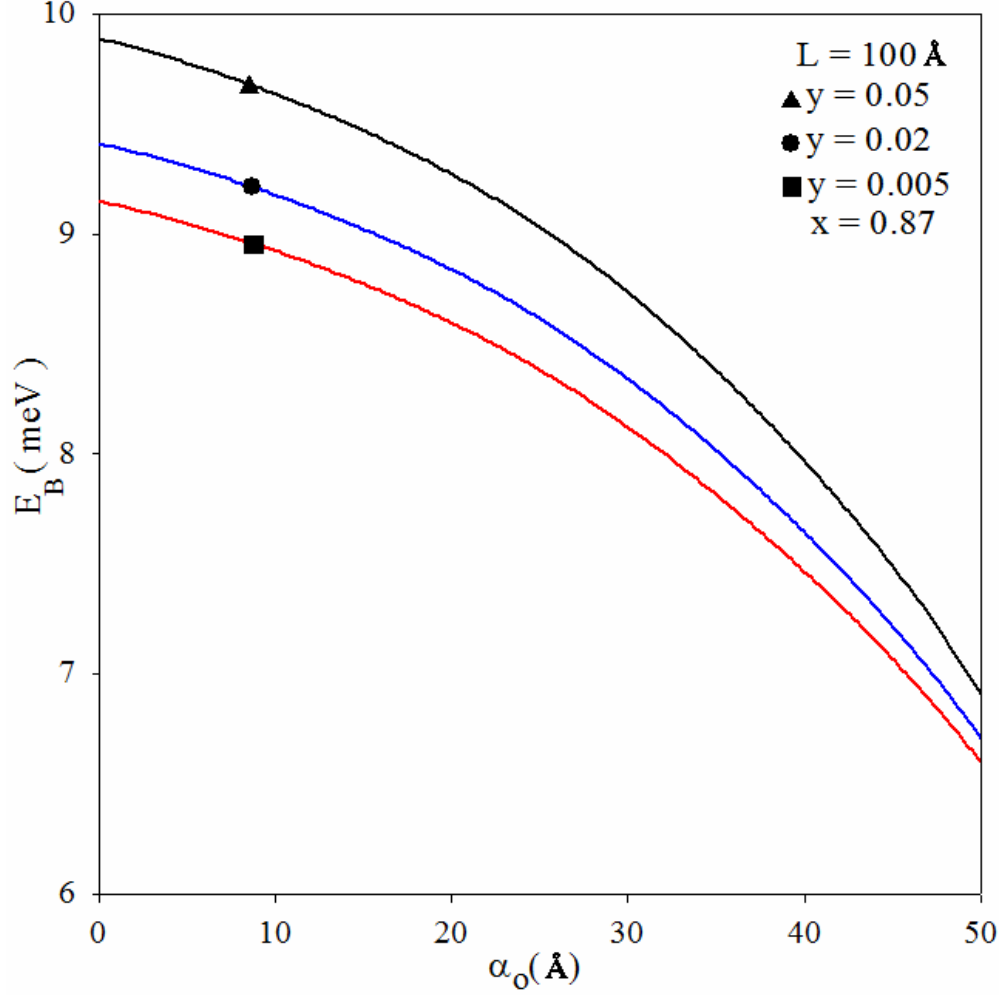
Şekil 8. 3’de yoğun lazer alanı olmadığı durumda, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunda farklı indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Tüm indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjilerinin küçük L değerlerine gittikçe artmakta buna karşın büyük L değerlerine gidildikçe azalmakta olduğu görülmektedir. Büyük L değerlerinde iki boyutluluk bozulmakta ve ekziton üç boyutlu uzaydaki gibi davranmaya başlamaktadır. Şekil 8. 2’ de görüldüğü gibi indiyum konsantrasyonunun artmasıyla ekziton bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. İndiyum konsantrasyonunun artması ile sistemin kuşatma potansiyeli, dielektrik sabiti artmakta buna karşın ekzitonun indirgenmiş kütlesi azalmaktadır. Kuşatma potansiyelindeki artma elektron-boşluk çiftinin kuyu içerisinde daha iyi lokalize olmasını ve bu nedenle de ekziton bağlanma enerjisinin artışına neden olur. Buna karşın ekzitonun indirgenmiş kütlesindeki azalma, ekzitonu daha enerjik hale getirdiğinden kuyu dışına sızmalar artar ve bunun sonucu olarak da bağlanma enerjisi azalır. Burada, ekzitonun indirgenmiş kütlesindeki azalma sonucu bağlanma enerjisindeki azalma, kuşatma potansiyelindeki artma sonucu oluşan artmadan daha baskın olduğu için indiyum konsantrasyonunun artması ile bağlanma enerjisi azalmaktadır.



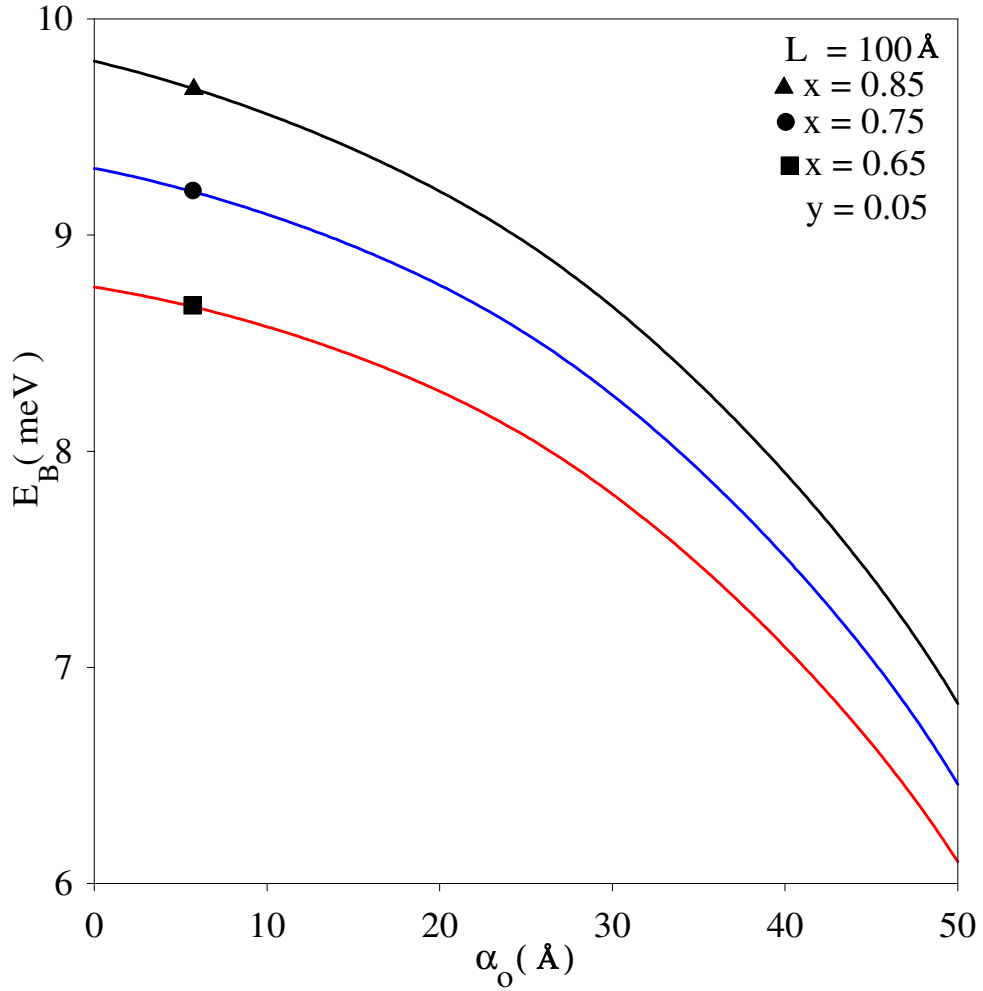
Şekil 8.3 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 8. 4’de genişliği $L = 100 \text{ \AA}$ olan $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı azot konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi verilmiştir. Ele alınan bütün azot konsantrasyonları için yoğun lazer alanının artması ile ekziton bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. Yoğun lazer alanının artmasıyla yük taşıyıcılarının (elektron-boşluk) geometrik kuşatması artar. Geometrik kuşatmanın artması yük taşıyıcılarının daha enerjik olmasına neden olur ve yük taşıyıcıların kuyu dışına sızmalarına neden olur ve böylece elektron ve boşluğun aynı düzlemde bulunma olasılığı zayıflar. Bu davranış elektron ve boşluk arasındaki Coulombic etkileşimi zayıflattığı için bağlanma enerjisi azalır. Ayrıca bütün lazer alan değerlerinde azot konsantrasyonunun artmasıyla bağlanma enerjisinin artmakta olduğunda görmekteyiz. Daha öncede açıkladığımız gibi azot konsantrasyonunun artmasıyla elektron ve boşluk kuyu içerisinde daha iyi lokalize olurlar ve bağlanma enerjisinin artırmasına neden olurlar.

Şekil 8. 5’de genişliği $L = 100 \text{ \AA}$ olan $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi verilmiştir. Ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi Şekil 8. 4’deki değişim ile benzerdir. Şekil 8. 4 için yapılan açıklamalar burada da geçerlidir. İndiyum konsantrasyonunun artması ile bütün lazer alan değerlerinde bağlanma enerjisinin beklenildiği gibi azalmakta olduğu gözlenmektedir.

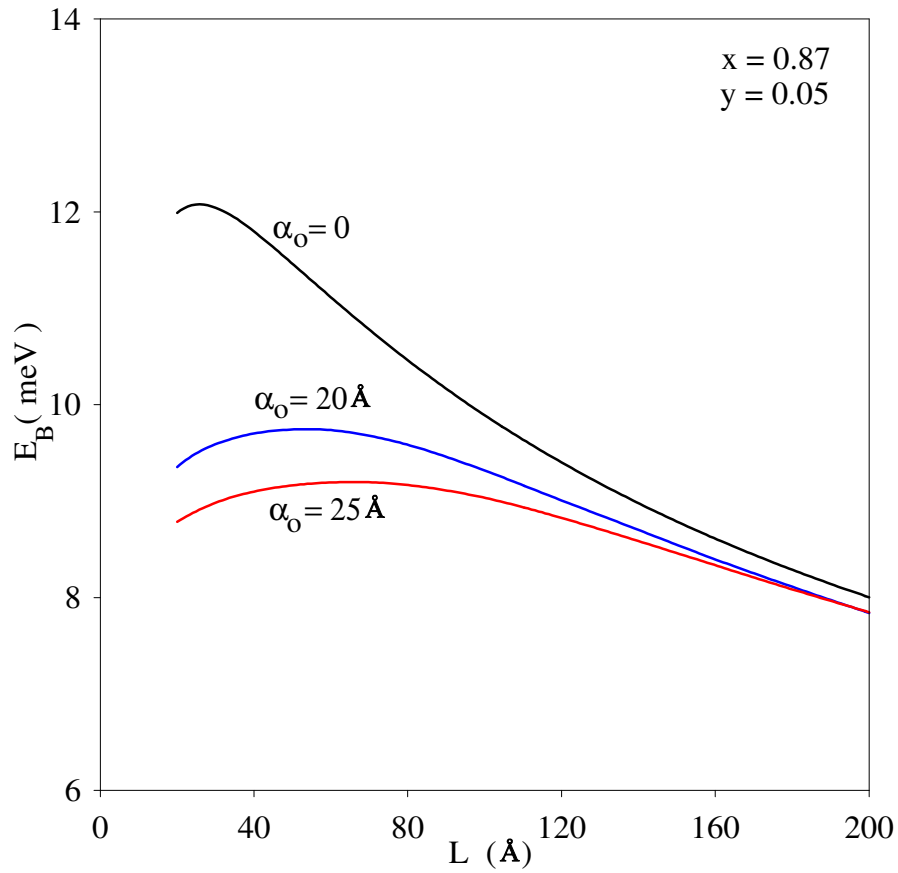


Şekil 8. 4 Genişliği $L = 100 \text{ \AA}$ olan $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı azot konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi.



Şekil 8. 5 Genişliği $L = 100 \text{ \AA}$ olan $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı indiyum konsantrasyonları için ekziton bağlanma enerjisinin yoğun lazer alanına göre değişimi.

Şekil 8. 6'da $x = 0.87$ ve $y = 0.05$ oranları için, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı yoğun lazer alanlarında ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi küçük L değerlerinde yoğun lazer alanının ekziton bağlanma enerjisine etkisi çok belirgin iken büyük L değerlerinde bu etki azalmaktadır. Bu davranışı şu şekilde açıklayabiliriz; bilindiği gibi dar kuantum kuyularında geometrik kuşatma ekzitonik yapı üzerinde daha etkilidir. Dolayısıyla bu rejimde geometrik kuşatma potansiyelinde meydana gelen her değişiklik bağlanma enerjisinde önemli değişimlere neden olur.



Şekil 8. 6 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusunda farklı yoğun lazer alanlar için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

9. SONUÇLAR

Bu çalışmada $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusundan oluşan heteroyapının elektronik bant yapısı FEM metodu ile hesaplanarak azot ve indiyum oranlarının elektronik yapı üzerindeki etkisi incelenmiş ve ekzitonik yapının yoğun lazer alanı (ILF) altındaki davranışı araştırılmıştır.

Çalışmamızın ilk aşamasında $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ külçe yarıiletken malzemesinin elektronik bant yapısı 6+4 bant **k.p** teorisi yardımıyla incelenmiştir. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ külçe yarıiletken malzemeler için elde edilen Luttinger-Kohn Hamiltonian matrisleri kullanılarak $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sisteminin elektronik bant yapısı azot ve indiyum konsantrasyonlarına bağlı değişimi çoklu bant etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde (**k.p** teorisi) sonlu elemanlar yöntemi ile incelenmiştir. Sonlu elemanlar yöntemi ile yapılan elektronik bant yapısı hesaplamalarında global elementteki nod sayısı 5, toplam nod sayısı 5000 alınmıştır. Bu enerji özdeğerleri hesaplamalarında çok küçük hata miktarlarına karşılık gelmektedir. Yapılan çalışmada azot ve indiyum konsantrasyonlarının, yapının etkin kütle, dielektrik sabiti ve yasak bant enerji aralığı gibi fiziksel büyüklüklerini değiştirerek, yarıiletken malzemenin bant yapısının önemli bir ölçüde değiştirdiği görülmüştür.

Çalışmamızın ikinci kısmında, yoğun lazer alanı altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyunun kuşatma potansiyeli ve altbant yapısı üzerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi incelenmiştir. Uygulanan yoğun lazer alanı yapının kuşatma potansiyelini değiştirdiği ve bunun sonucu olarak bağlı durum enerji düzeylerinin belirgin bir şekilde değiştiği görülmüştür.

Çalışmamızın son kısmında ise, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusundaki yük taşıyıcıların davranışları ve oluşturdukları ekzitonik yapının bağlanma enerjisinin z yönünde uygulanan yoğun lazer alana, N ve In konsantrasyonuna ve kuantum kuyu genişliğine (L) bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenmiştir. Kuantum kuyusundaki ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine sıkı bir şekilde bağlı olduğu ve bu kuyu değerlerine göre yapının davranışının değiştiği görülmüştür. Kuyu genişliğinin $20 \text{ \AA} < L < 60 \text{ \AA}$ değerleri için bağlanma enerjisi iki boyutlu sistem değerlerine yaklaştığı gözlenmiştir. Kuyu genişliğinin çok küçük ve çok büyük değerlerinde kuşatmanın zayıflaması sonucu yapının külçe malzemedeki davranışa yaklaştığı görülmüştür. Bu nedenle de bağlanma enerjisinin azalmakta olduğu

görüldü. Ayrıca, yapıdaki azot ve indiyum konsantrasyonunun da eksiton bağlanma enerjisini önemli bir biçimde değiştirdiği görüldü. Azot konsantrasyonunun artması ile sistemin kuşatma potansiyeli, kuantum kuyusundaki ekzitonun indirgenmiş kütlesi artmakta buna karşın dielektrik sabiti azalmaktadır. Kuşatma potansiyelindeki artma ve kuantum kuyusundaki eksitonun indirgenmiş kütlesindeki artma elektron-boşluk çiftinin kuyu içerisinde daha iyi lokalize olmasını ve bu nedenle de ekziton bağlanma enerjisinin artmasına neden olduğu görülmüştür. İndiyum konsantrasyonunun artması ile sistemin kuşatma potansiyeli, dielektrik sabiti artmakta buna karşın ekzitonun indirgenmiş kütlesi azalmaktadır. Eksitonun indirgenmiş kütlesindeki azalma, ekzitonu daha enerjik hale getirdiğinden ekzitonu oluşturan parçacıkların kuyu dışına sızmaları artar. Bunun sonucu olarak indiyum konsantrasyonunun artması ile bağlanma enerjisinin azalmakta olduğu görülmüştür. Yoğun lazer alanının artması ile ekziton bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. Geometrik kuşatmanın lazer alanı ile artması yük taşıyıcılarının daha enerjik olmasına neden olur, bu da yük taşıyıcıların kuyu dışına sızmalarını artırır. Böylece elektron ve boşluğun aynı düzlemde bulunma olasılığı zayıflar. Bu davranış elektron ve boşluk arasındaki Coulombic etkileşimi zayıflattığı için bağlanma enerjisi azalır. Sonuç olarak $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusundaki ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliği, yoğun lazer alanı, azot ve indiyum konsantrasyonlarını değiştirerek istenilen şekilde ayarlanabileceği söylenebilir.

Bu tez çalışmasında kullanılan yöntem, III-N-V bileşiklerden oluşturulmuş kuantum kuyu sisteminin elektronik özelliklerini iyi bir şekilde tanımlama olanağı sağlamıştır. Yoğun lazer alanı, kuyu genişliği, azot ve indiyum konsantrasyonlarını değiştirerek $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özellikleri amaca uygun biçimde ayarlanabileceği görülmüştür. Elde edilen sonuçların teknolojiye ve aygıt tasarımına yeni katkılar sağlayacağı beklenmektedir. Bu sonuçlarla özellikle geniş dalga boyu aralığını kapsayan veri depolama üniteleri, güneş pilleri, foto dinamik terapi, gaz sensörleri, terahertz cihazlar gibi yeni bir çok optoelektronik cihazın geliştirilmesi beklenebilir.

KAYNAKLAR

1. L. Esaki and R. Tsu 'Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors' IBM Res. Note, RC-2414 (1969).
2. D. S. Citrin and Y. C. Chang, Phys. Rev. B 40, 5507 (1989).
3. T. Yamauchi, Y. T. Takahasi, and Y. Arakawa, IEEE J. Quantum Electron. 27, 1817 (1991).
4. C. Pryor, Phys. Rev. B 44, 12912 (1991).
5. J. Searles and E. I. Von Nagy-Felsobuki, Am. J. Phys. 50, 444 (1988).
6. K. Kojima, K. Mitsunaga, and K. Kyuma, Appl. Phys. Lett. 55, 882 (1989).
7. K. Nakamura, A. Shimizu, M. Koshihara, and K. Hayata, IEEE J. Quantum Electron. 25, 889 (1989).
8. J. C. Yi and N. Dagli, IEEE J. Quantum Electron. 31, 208 (1995).
9. M. Kondow, K. Uomi ve arkadaşları, in Proc. 1995 Solid State Device and Mater., Osaka, Japan, 1995, pp.1016-1018.
10. M. Kondow, K. Uomi ve arkadaşları, Jpn. J. Appl. Phys. 35, 1273 (1996).
11. M. Kondow, T. Kitatani, S. Nakatsuka, M. C. Larson, K. Nakahara, Y. Yazawa, M. Okai, IEEE J. Selected Topics in Quantum Electronics 3, 719 (1997).
12. J. Kasai, T. Kitatani, K. Adachi, K. Nakahara, M. Aoki, J. Crystal Growth 301, 545 (2007).
13. I. Akasaki, H. Amano, Y. Koide, K. Hiramatsu and N. Sawaki, Effects of ain buffer layer on crystallographic structure and on electrical and optical-properties of GaN and $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ (0-less-than-x-less-than-or-equal-to- 0.4) films grown on sapphire substrate by MOVPE, J. Cryst. Growth, **98**, 209 (1989).
14. S. Nakamura, GaN growth using GaN buffer layer, Jpn. J. Appl. Phys., **30**, L1705 (1991).
15. H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu and I. Akasaki, P-type conduction in Mg-doped GaN treated with low-energy electron-beam irradiation (LEEBI), Jpn. J. Appl. Phys., 28, L2112 (1989).
16. S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh and N. Iwasa, Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN films, Jpn. J. Appl. Phys., **31**, L139 (1992).
17. S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyaku and Y. Sugimoto, InGaN-based multi-quantum-well-structure laser diodes, Jpn. J. Appl. Phys., **35**, L74 (1996).

18. T. Kageyama, T. Miyamoto, S. Makino, F. Koyama and K. Iga, *J. Crystal Growth* 350, 620 (2000).
19. K. S. Kim, et al., *J. Crystal Growth* 287, 620 (2006).
20. S. Mazzucato, A. Erol, R. J. Potter, N. Balkan, P. R. Chalker, S. Thomas, T. B. Joyce and T. J. Bullough, *Solid State Electronics* 47, 483 (2003).
21. Richard Potter, "Optical Properties in dilute Nitrides", PhD thesis, University of Essex, November 2002.
22. J. Geske, K. G. Gan, Yae L. Piprek and J. E. Bowers, *IEEE J. Quantum Electronics* 40,1155 (2004).
23. J. Geske, D. Leonard, M. MacDougall, Y. L. Okuno, J. Piprek and J. E. Bowers, *European Conf. Optical Communications*, Paper We4.P.79, Rimini, Italy, Sept. 21-25, 2003.
24. J. Geske, D. Leonard, M. H. MacDougall, B. Barnes and J. E. Bowers, *IEEE Photon. Technol. Lett.*, 16, 1227 (2004).
25. Kent PRC, Zunger A. *Phys Rev B* 64, 115208 (2001)
26. Kent PRC, Zunger A. *Phys Rev Lett* 86, 2613 (2001)
27. Murdin BN, Adams AR, Murzyn P, Pidgeon CR, Bradley IV, Wells J-PR, et al. *Apply Phys Lett* 81, 256 (2002).
28. Mattila T, Wei S-H, Zunger A. *Phys Rev Lett* 60, 11245 (1999).
29. Gonzalez Szwacki N, Boguslawski P. *Phys Rev B* 64, 161201 (2001).
30. Wei S-H, Zunger A. *Phys Rev Lett* 76, 664 (1996).
31. A. Lindsay and E.P. O'Reilly, Theory of enhanced bandgap non-parabolicity in GaNAs and related alloys, *Solid State Comms.*, 112, 443 (1999).
32. T. Kitatani, M. Kondow, T. Kikawa, Y. Yazawa, M. Okai and K. Uomi, Analysis of band offset in GaNAs/GaAs by X-ray photoelectron spectroscopy, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 38, 5003 (1999).
33. P. Krispin, S.G. Spruytte, J.S. Harris and K.H. Ploog, Electrical depth profile of p-type GaAs/Ga(As, N)/GaAs heterostructures determined by CV measurements, *J. Appl. Phys.*, **88**, 4153 (2000).
34. I.A. Buyanova, G. Pozina, P.N. Hai, W.M. Chen, H.P. Xin HP and C.W. Tu, Type I band alignment in the GaN_xAs_{1-x}/GaAs quantum wells, *Phys. Rev. B.*, 63, 033303 (2001).

35. B.Q. Sun, D.S. Jiang, X.D. Luo, Z.Y. Xu, Z. Pan, L.H. Li and R.H. Wu, Interbandluminescence and absorption of GaNAs/GaAs single-quantum-well structures, *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 2862 (2000).
36. P.J. Klar, H. Gruning, W. Heimbrodt, J. Koch, W. Stolz, P.M.A. Vicente, A.M. Kamal Saadi, A. Lindsay and E.P. O'Reilly, Pressure and temperature dependent studies of GaNAs/GaAs quantum well structures, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **223**, 163 (2001).
37. Y. N. Qiu, H. D. Sun, J. M. Rorison, S. Calvez, M. D. Dawson and A. C. Bryce, *Semicond. Sci. Technol.* **23**, 095010 (2008).
38. S. T. Ng, W. J. Fan, Y. X. Dang and S. F. Yoon, *Physical Rev. B*, **72**, 115341 (2005).
39. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
40. J.E. Pask, B.M. Klein, P.A. Sterne, C.Y. Fong, *Computer Physics Communications* **135**,1 (2001).
41. S. Strite, D. Chandrasekhar, D. J. Smith, J. Sariel, H. Chan, N. Teraguchi, H. Morkoc, *J. Crystal. Growth* **127** (1993) 204.
42. A. Tadjer, B. Abbar, M. Rekzi, H. Aourag, M. Certier, *J. Phys. Chem. Solids* **60** (1999) 419.
43. S. H. Wei, A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996) 2719.
44. A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* **82** (1997) 2833.
45. K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, *Phys. Rev.* **53** (1996) 16310.
46. S. H. Park, S. L. Chuang, *J. Appl. Phys.* **87** (2000) 353.
47. A. T. Meney, E. P. O'Reilly, A. R. Adams, *Semicond. Sci. Technol.* **11** (1996) 897.
48. S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand, R. A. Abram, *Semicond. Sci. Technol.* **14** (1999) 23.
49. W. W. Chow, A. F. Wright, J. S. Nelson, *Appl. Phys. Lett.* **68** (1996) 296.
50. V. I. Gavrilenko, R. Q. Wu, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 2632.
51. E. H. Li, *Physica E* **5** (2000) 215.
52. R. Goldhahn, J. Scheiner, S. Shokhovets, T. Frey, U. Kohler, D. J. As, K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **76** (2000) 291.
53. M. Kondow, K. Uomi, K. Hosomi, T. Mozume, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* **33** (1992) L1056.
54. T. Yang, S. Nakajima, S. Sakai, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* **36** (1997) L230.

- 55.** C. Weisbuch and B. Vinter, *Quantum Semiconductor Structures* (Academic Press, Orsay, France, 1991).
- 56.** V. V. Mitin, V. A. Kochelap, and M. A. Strosio, *Quantum Heterostructures* (Cambridge Univ.Press, New York, 1999).
- 57.** S. D. Ganichev and W. Prettl, *Intense Terahertz Excitation of Semiconductors* (Oxford Univ. Press, Oxford, 2006).
- 58.** A. P. Jauho and K. Johnsen, *Phys. Rev. Lett.* 76, 4576 (1996); W. Xu, *Europhys. Lett.* 40, 411 (1997); J. Kono, M. Y. Su, T. Inoshita, T. Noda, M. S. Sherwin, S. J. Allen Jr., and H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* 79, 1758 (1997); H. Nakano, H. Kubo, N. Mori, C. Hamaguchi, and L. Eaves, *Physica E* 7, 555 (2000); N. Mori, T. Takahashi, T. Kambayashi, H. Kubo, C. Hamaguchi, L. Eaves, C. T. Foxon, A. Patane, and M. Henini, *Physica* B314,431(2002).
- 59.** B. G. Enders, F. M. S. Lima, O. A. C. Nunes, A. L. A. Fonseca, D. A. Agrello, F. Qu, E. F. Da Silva, Jr., and V. N. Freire, *Phys. Rev. B* 70, 035307 (2004).
- 60.** F. M. S. Lima, O. A. C. Nunes, A. L. A. Fonseca, M. A. Amato, and E. F. da Silva Jr, *Semicond. Sci. Technol.* 23, 125038 (2008).
- 61.** R. G. Mani, J. H. Smet, K. von Klitzing, V. Narayanamurti, W. B. Johnson, and V. Umansky, *Nature* 420, 646 (2002). For a theoretical description, see: J. Inarrea and G. Platero, *Phys. Rev. Lett.* 94, 016806 (2005).
- 62.** L. C. M. Miranda, *Sol. State Communic.* 45, 783 (1983); Y. Mizumoto, Y. Kayanuma, A. Srivastava, J. Kono, and A. H. Chin, *Phys. Rev. B* 74, 045216 (2006).
- 63.** O. A. C. Nunes, *J. Appl. Phys.* 58, 2102 (1985); K.B. Nordstrom, K. Johnsen, S. J. Allen, A. P. Jauho, B. Birnir, J. Kono, T. Noda, H. Akiyama, and H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* 81, 457 (1998); S. Hughes and D. S. Citrin, *Phys. Rev. Lett.* 84, 4228 (2000); T. Y. Zhang and W. Zhao, *Phys. Rev. B* 73, 245337 (2006).
- 64.** E. Gerck and L. C. M. Miranda, *Appl. Phys. Lett.* 44, 837 (1984).
- 65.** E. C. Valadares, *Phys. Rev. B* 41, 1282 (1990); C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* 78, 4187 (2001).
- 66.** Q. Fanyao, A. L. A. Fonseca, and O. A. C. Nunes, *Phys. Stat. Sol. (b)* 197, 349 (1996).
- 67.** F. Ehlitzky, *Can. J. Phys.* 63, 907 (1985); *Phys. Lett. A* 126, 524 (1988).

- 68.** A. Radu, E. C. Niculescu, and M. Cristea, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* 10, 2555 (2008).
- 69.** H. Sari, E. Kasapoglu, I. Sokmen, and N. Balkan, *Semicond. Sci. Technol.* 18, 470 (2003).
- 70.** H. Sari, E. Kasapoglu, I. Sokmen, and M. Gunes, *Phys. Lett. A* 319, 211 (2003); E. Kasapoglu, H. Sari, U. Yesilgul, and I. Sokmen, *J. Phys.: Condens. Matter* 18, 6263 (2006); N. R. Das and S. Sen, *Phys. B* 403, 3746 (2008).
- 71.** O. O. Diniz Neto and F. Qu, *Superlatt. Microstruct.* 35, 1 (2004).
- 72.** This approximation works when K and z are such that $\exp(\pm iKz) \approx 1$. In our QW, this reads $KL \ll 1$ and, since $K = \omega\eta/c$, where η is the refractive index of the hosting material, one has $\omega \ll c/(\eta L)$. In GaAs, $\eta = 3.3$ and then $\nu = 1447$ THz for a 100 Å-wide QW.
- 73.** H. A. Kramers, *Collected Scientific Papers* (Amsterdam, North-Holland, 1956), p. 866.
- 74.** W. C. Hennenberg, *Phys. Rev. Lett.* 21, 838 (1968).
- 75.** The operator U can be decomposed as $U = U_1 U_2$, where $U_1 = \exp[-i/\hbar(e/m^* \int A \cdot p dt)]$ is a translation operator and $U_2 = \exp[-i/\hbar(e^2/2m^* \int A^2 dt)]$ produces only a gauge transformation which, in the dipole approximation, can be removed by a shift in the phase of $\psi(z, t)$. See details in: P. W. Milonni and J. R. Ackerhalt, *Phys. Rev. A* 39, 1139 (1989).
- 76.** F. M. S. Lima, O. A. C. Nunes, M. A. Amato, A. L. A. Fonseca, and E. F. da Silva Jr, *J. Appl. Phys.* 103, 113112 (2008).
- 77.** M. Gavrilă and J. Z. Kaminski, *Phys. Rev. Lett.* 52, 613 (1984).
- 78.** M. Gavrilă, in *Atoms in Intense Laser Fields*, edited by M. Gavrilă (Academic Press, New York, 1992).
- 79.** In the limit $\alpha_0 \rightarrow 0$, it is easy to show that $\langle V \rangle(z; \alpha_0) \rightarrow V_b(z)$, since $V_0 / 2\pi x \int_0^{2\pi} \Theta(|z| - l) du = V_0 \Theta(|z| - l)$. Therefore, in this limit our expression recovers the rectangular QW profile found in the absence of external fields.
- 80.** F. M. S. Lima, M. A. Amato, O. A. C. Nunes, A. L. A. Fonseca, B. G. Enders, and E. F. da Silva Jr, *J. Appl. Phys.* (Dated: April 24, 2009).

EK-1 Kane modeli için elde edilen Hamiltoniannın matris elemanlarının bulunması

k.p teorisi pertürbasyon temelli bir teori idi ve teorideki yöntem, incelenen sistemin Hamiltoniyenin ilgililenen bantlardaki fonksiyonlar bazındaki matris temsilini elde etmek idi. Bu aşamadan sonra elde edilen matris temsilinde özdeğer ve özvektörler bulunuyordu.

Örneğin, spin-yörünge etkileşimli bir sistem için çözülecek olan Schrödinger denklemi

$$\left[H(\vec{k}=0) + W(\vec{k}) \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}}(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1)$$

$$H(\vec{k}=0) = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{p}$$

$$W(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$$

ile veriliyordu. Burada aranan, $E_{n\vec{k}}(\vec{k})$ enerjisi ve bu enerjiye karşılık gelen

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_m c_m^n(\vec{k}) U_{m0}(\vec{r}) \quad (2)$$

özfonksiyonları idi. Çözüm için (1) deki Hamiltoniyenin (2) deki $U_{m0}(\vec{r})$ fonksiyonları bazındaki matris temsili yazılıp, bu matrisin özdeğerleri ve özvektörleri bulunur.

1.1 Baz Kümesi

(1) de verilen Hamiltoniyenin matris temsilini arıyoruz. İlgilendiğimiz bantlar, iletkenlik bandı ve valans bantları (ağır boşluk, hafif boşluk, spin-yörünge bandı). Spinden dolayı her bir banda ait fonksiyon iki kez yozlaşmıştır. Dolayısıyla baz fonksiyonları kümesi 8 elemanlı olacaktır. Bu elemanlardan ikisi iletkenlik bandına ait spin yukarı ve spin aşağı durumlu fonksiyonlar geri kalan 6 sı ise valans bantlarına ait spin aşağı ve spin yukarı durumlu fonksiyonlardır.

$$\{|u_i\rangle\} = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, |u_4\rangle, |u_5\rangle, |u_6\rangle, |u_7\rangle, |u_8\rangle\}$$

$$\begin{aligned}
|u_1\rangle &= |S \uparrow\rangle & |u_2\rangle &= |S \downarrow\rangle \\
|u_3\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle & |u_4\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{6}}|(X-iY) \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|Z \downarrow\rangle \\
|u_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|(X+iY) \uparrow\rangle & |u_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|(X-iY) \downarrow\rangle \\
|u_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|Z \uparrow\rangle & |u_8\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}}|(X-iY) \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|Z \downarrow\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H(k=0)|u_1\rangle &= 0 & H(k=0)|u_2\rangle &= 0 \\
H(k=0)|u_3\rangle &= -\varepsilon_0|u_3\rangle & H(k=0)|u_4\rangle &= -\varepsilon_0|u_4\rangle \\
H(k=0)|u_5\rangle &= -\varepsilon_0|u_5\rangle & H(k=0)|u_6\rangle &= -\varepsilon_0|u_6\rangle \\
H(k=0)|u_7\rangle &= (-\varepsilon_0 - \Delta)|u_7\rangle & H(k=0)|u_8\rangle &= (-\varepsilon_0 - \Delta)|u_8\rangle
\end{aligned}$$

$$H_{11} = \langle iS \uparrow | H(k) | iS \uparrow \rangle = \langle iS \uparrow | H(k=0) + W(k) | iS \uparrow \rangle = \underbrace{\langle iS \uparrow | H(k=0) | iS \uparrow \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | W(k) | iS \uparrow \rangle$$

$$H_{11} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \uparrow \rangle = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | iS \uparrow \rangle + \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \uparrow \rangle}_0$$

$$H_{11} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$H_{12} = \langle iS \uparrow | H(k) \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle = \langle iS \uparrow | H(k=0) + W(k) \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{12} = \underbrace{\langle iS \uparrow | H(k=0) \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle}_0 + \langle iS \uparrow | W(k) \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{12} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{12} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle}_0 + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{12} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle \right\rangle + \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| \frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle}_0 = (-i) \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \right) \frac{\hbar k_z}{m_0} \langle S \uparrow | P_z | Z \uparrow \rangle$$

Bu işlemler yapılırken baz fonksiyonlarının ortogonalite özellikleri ve spin durumları göz önüne alınmıştır. Şimdi $\frac{-i}{m_0} \langle S \uparrow | P_z | Z \uparrow \rangle = P$ tanımını yaparsak,

$$H_{12} = -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z \text{ sonucunu elde etmiş oluruz.}$$

$$H_{13} = \langle iS \uparrow | H(k) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle = \langle iS \uparrow | H(k=0) + W(k) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle$$

$$H_{13} = \underbrace{\langle iS \uparrow | H(k=0) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle}_0 + \langle iS \uparrow | W(k) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle$$

$$H_{13} = \langle iS \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \rangle = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle}_0 + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle$$

$$H_{13} = (-i) \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle S \uparrow | P_x | X \uparrow \rangle + (-i) \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle S \uparrow | P_y | Y \uparrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_x P + i \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_y P$$

Burada $k_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (k_x \pm ik_y)$ tanımlarsak,

$H_{13} = P \hbar k_+$ elde edilmiş olur.

$$H_{14} = \langle iS \uparrow | H(k) \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle = \langle iS \uparrow | H(k=0) + W(k) \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle$$

$$H_{14} = \underbrace{\langle iS \uparrow | H(k=0) \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | W(k) \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle$$

$$H_{14} = \langle iS \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle$$

$$H_{14} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle$$

$$H_{14} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow \right\rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \left| \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \right\rangle \rangle = -(i) \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_z}{m_0} \langle S \uparrow | P_z | Z \uparrow \rangle$$

$H_{14} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z$ elde edilir.

$$H_{15} = \langle iS \uparrow | H(k) | iS \downarrow \rangle = 0$$

$$H_{16} = \langle iS \uparrow | H(k) | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle = \langle iS \uparrow | H(k=0) + W(k) | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{16} = \underbrace{\langle iS \uparrow | H(k=0) | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | W(k) | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{16} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{16} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{16} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle \rangle + \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0$$

$$H_{16} = (-i) \left(-\frac{1}{\sqrt{6}}\right) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle S \uparrow | P_x | X \uparrow \rangle + (-i) \left(-\frac{1}{\sqrt{6}}\right) \frac{\hbar k_y}{m_0} (-i) \langle S \uparrow | P_y | Y \uparrow \rangle$$

$$H_{16} = \left(-\frac{1}{\sqrt{6}}\right) \hbar k_x P + (i) \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right) \hbar k_y P \quad H_{16} = -\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_- \text{ elde edilmiş olur.}$$

$$H_{17} = \langle iS \uparrow | H(k) | \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \rangle = 0$$

$$H_{18} = \langle iS \uparrow | H(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle = \langle iS \uparrow | H(k=0) + W(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{18} = \underbrace{\langle iS \uparrow | H(k=0) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | W(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{18} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{18} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{18} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle \rangle + \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0$$

$$H_{18} = (-i) \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle S \uparrow | P_x | X \uparrow \rangle + (-i) \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{\hbar k_y}{m_0} (-i) \langle S \uparrow | P_y | Y \uparrow \rangle$$

$$H_{18} = \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\hbar k_x P + (-i)\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\hbar k_x P$$

$$H_{18} = -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_x$$

$$H_{21} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k) \right| iS \uparrow \right\rangle = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{21} = \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k=0) \right| iS \uparrow \right\rangle}_{0} + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| W(k) \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{21} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{21} = \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_{0} + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{21} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle + \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_{0}$$

$$H_{21} = -\sqrt{\frac{2}{3}}\hbar k_z \frac{i}{m_0} \langle Z \uparrow | P_z | S \uparrow \rangle$$

$$H_{21} = -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z \text{ elde edilir.}$$

$$H_{22} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k) \right| -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \right\rangle$$

$$H_{22} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k=0) + W(k) \right| -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \right\rangle$$

$$H_{22} = \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k=0) \right| -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \right\rangle}_{=-\varepsilon_0} +$$

$$\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| W(k) \right| -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \right\rangle$$

$$H_{22} = -\varepsilon_0 + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle (X+iY) \downarrow | \right\rangle$$

$$H_{22} = -\varepsilon_0 + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| -\sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X + iY) \downarrow \rangle \right\rangle +$$

$$\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| -\sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X + iY) \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{22} = -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ elde edilir.}$$

$$H_{23} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X + iY) \uparrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{24} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} | (X + iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{25} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k) \right| iS \downarrow \right\rangle = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{25} = \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k=0) \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{25} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{25} = \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{25} = \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{25} = \frac{1}{\sqrt{6}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \downarrow | P_x | S \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} (-i) \langle Y \downarrow | P_y | S \downarrow \rangle$$

$$H_{25} = \frac{1}{\sqrt{6}} \hbar k_x P - i \frac{1}{\sqrt{6}} \hbar k_y P$$

$$H_{25} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_-$$

$$H_{26} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{27} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{28} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X+iY) \downarrow | \left| H(k) \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X-iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{31} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| iS \uparrow \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \uparrow \rangle \right.$$

$$H_{31} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k=0) \right| iS \uparrow \rangle}_0 = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| W(k) \right| iS \uparrow \rangle \right.$$

$$H_{31} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \rangle \right.$$

$$H_{31} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \uparrow \rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \rangle \right.$$

$$H_{31} = \frac{1}{\sqrt{2}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \uparrow | P_x | S \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} (-i) \langle Y \uparrow | P_y | S \uparrow \rangle$$

$$H_{31} = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_x P - i \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_y P$$

$$H_{31} = P \hbar k_- \text{ elde edilir.}$$

$$H_{32} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X+iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{33} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \rangle \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k=0) + W(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{33} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k=0) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \rangle \right\rangle + \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| W(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{33} = -\varepsilon_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{33} = -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ elde edilir.}$$

$$H_{34} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{35} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| iS \downarrow \right\rangle = 0$$

$$H_{36} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| - \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X-iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{37} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X-iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{38} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \left| H(k) \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \left| (X-iY) \uparrow \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| Z \downarrow \right\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{41} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k) \right| iS \uparrow \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \uparrow \right\rangle \right.$$

$$H_{41} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k=0) \right| iS \uparrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| W(k) \right| iS \uparrow \right\rangle \right.$$

$$H_{41} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle \right.$$

$$H_{41} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle \right.$$

$$H_{41} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{41} = i \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_z}{m_0} \langle Z \uparrow | P_z | S \uparrow \rangle$$

$$H_{41} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z \text{ elde edilmiş olur.}$$

$$H_{42} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k) \right| - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \left| Z \uparrow \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \left| (X+iY) \downarrow \right\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{43} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \left| (X+iY) \uparrow \right\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{44} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} \left| (X+iY) \downarrow \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| Z \uparrow \right\rangle \right\rangle$$

$$H_{44} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k=0) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} \left| (X+iY) \downarrow \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| Z \uparrow \right\rangle \right\rangle +$$

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| H(k=0) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} \left| (X+iY) \downarrow \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| Z \uparrow \right\rangle \right\rangle$$

$$H_{44} = -\varepsilon_0 - \Delta + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow \left| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| W(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} \left| (X+iY) \downarrow \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| Z \uparrow \right\rangle \right\rangle$$

$$H_{44} = -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ elde edilir.}$$

$$H_{45} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k) \right| iS \downarrow \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{45} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k=0) \right| iS \downarrow \right\rangle}_{0} + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{45} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{45} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_{0} + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{45} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle + \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_{0}$$

$$H_{45} = i \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \downarrow | P_x | S \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} (-i)(i) \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle Y \downarrow | P_y | S \downarrow \rangle$$

$$H_{45} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_x - i \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_y$$

$$H_{45} = \sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_- \text{ şeklin de bulunmuş olur.}$$

$$H_{46} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k) \right| - \frac{1}{\sqrt{6}} | (X-iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{47} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X-iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{48} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k) \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} | (X-iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{51} = \langle iS \downarrow | H(k) | iS \uparrow \rangle = 0$$

$$H_{52} = \langle iS \downarrow | H(k) | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle = \langle iS \downarrow | H(k=0) + W(k) | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{52} = \underbrace{\langle iS \downarrow | H(k=0) | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle}_{0} + \langle iS \downarrow | W(k) | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{52} = \langle iS \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{52} = \underbrace{\left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle}_{0} + \left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{52} = \underbrace{\left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle}_{0} + \left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{6}} |(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{52} = (-i) \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle S \downarrow | P_x | X \downarrow \rangle + (-i)(i) \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle S \downarrow | P_y | Y \downarrow \rangle$$

$$H_{52} = \frac{1}{\sqrt{6}} \hbar k_x P + (i) \frac{1}{\sqrt{6}} \hbar k_y P$$

$$H_{52} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_+ \text{ elde edilir.}$$

$$H_{53} = \left\langle iS \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} |(X+iY) \uparrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{54} = \left\langle iS \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle = \left\langle iS \downarrow \left| H(k=0) + W(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{54} = \underbrace{\left\langle iS \downarrow \left| H(k=0) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle}_{0} + \left\langle iS \downarrow \left| W(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{54} = \left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{54} = \underbrace{\left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle}_{0} + \left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle$$

$$H_{54} = \left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle \right\rangle + \underbrace{\left\langle iS \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle}_{0}$$

$$H_{54} = (-i) \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle S \downarrow | P_x | X \downarrow \rangle + (-i) \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_y}{m_0} (i) \langle S \downarrow | P_y | Y \downarrow \rangle$$

$$H_{54} = \frac{1}{\sqrt{3}} \hbar k_x P + i \frac{1}{\sqrt{3}} \hbar k_y P$$

$$H_{54} = \sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_+ \text{ elde edilmiş olur.}$$

$$H_{55} = \left\langle iS \downarrow \left| H(k) \right| iS \downarrow \right\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$H_{56} = \langle iS \downarrow | H(k) \left| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = \langle iS \downarrow | H(k=0) + W(k) \left| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{56} = \underbrace{\langle iS \downarrow | H(k=0) \left| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \langle iS \downarrow | W(k) \left| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{56} = \langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{56} = \underbrace{\langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{56} = \underbrace{\langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| -\sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{56} = (-i) - \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar k_z}{m_0} \langle S \downarrow | P_z | Z \downarrow \rangle$$

$$H_{56} = -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z \text{ elde edilir.}$$

$$H_{57} = \langle iS \downarrow | H(k) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle = \langle iS \downarrow | H(k=0) + W(k) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{57} = \underbrace{\langle iS \downarrow | H(k=0) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \langle iS \downarrow | W(k) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{57} = \langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{57} = \underbrace{\langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \downarrow | \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{57} = (-i) \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle S \downarrow | P_x | X \downarrow \rangle + (-i) \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar k_y}{m_0} (-i) \langle S \downarrow | P_y | Y \downarrow \rangle$$

$$H_{57} = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_x P - i \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_y P$$

$$H_{57} = P \hbar k_- \text{ elde edilir.}$$

$$H_{58} = \langle iS \downarrow | H(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle = \langle iS \downarrow | H(k=0) + W(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{58} = \underbrace{\langle iS \downarrow | H(k=0) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_{0} = \langle iS \downarrow | W(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{58} = \langle iS \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{58} = \underbrace{\langle iS \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_{0} + \langle iS \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{58} = \underbrace{\langle iS \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle \rangle}_{0} + \langle iS \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{58} = (-i) \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_z}{m_0} \langle S \downarrow | P_z | Z \downarrow \rangle$$

$$H_{58} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z \text{ elde edilir.}$$

$$H_{61} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | iS \uparrow \rangle \right\rangle = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k=0) + W(k) | iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{61} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k=0) | iS \uparrow \rangle \right\rangle}_{0} + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | W(k) | iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{61} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{61} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | iS \uparrow \rangle \right\rangle}_{0} + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{61} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \uparrow \rangle \right\rangle + \underbrace{\left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \uparrow \rangle \right\rangle}_{0}$$

$$H_{61} = -\frac{1}{\sqrt{6}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \uparrow | P_x | S \uparrow \rangle + -\frac{1}{\sqrt{6}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle Y \uparrow | P_y | S \uparrow \rangle$$

$$H_{61} = -\frac{1}{\sqrt{6}} \hbar k_x P - \frac{1}{\sqrt{6}} (i) \hbar k_y P$$

$$H_{61} = -\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_+ \text{ elde edilir.}$$

$$H_{62} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | -\sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X + iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{63} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | \frac{1}{\sqrt{2}} | (X + iY) \uparrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{64} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | \frac{1}{\sqrt{3}} | (X + iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \uparrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{65} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | iS \downarrow \rangle = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k=0) + W(k) | iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{65} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k=0) | iS \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | W(k) | iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{65} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{65} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | iS \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{65} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} | iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{65} = -\sqrt{\frac{2}{3}} (i) \frac{\hbar k_z}{m_0} \langle Z \downarrow | P_z | S \downarrow \rangle$$

$$H_{65} = -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z$$

$$H_{66} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = -\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$H_{67} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{68} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | H(k) | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{71} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow | H(k) | iS \uparrow \rangle = 0$$

$$H_{72} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow | H(k) | -\sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X + iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{73} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY \uparrow) \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{74} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY \downarrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{75} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k) \right| iS \downarrow \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{75} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k=0) \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| W(k) \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{75} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{75} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{75} = \frac{1}{\sqrt{2}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \downarrow | P_x | S \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle Y \downarrow | P_y | S \downarrow \rangle$$

$$H_{75} = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_x P + (i) \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_y P$$

$$H_{75} = P \hbar k_+ \text{ elde edilir.}$$

$$H_{76} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY \uparrow) - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{77} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY \downarrow) \right\rangle = -\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$H_{78} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{3}} (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{81} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| iS \uparrow \rangle = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{81} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k=0) \right| iS \uparrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| W(k) \right| iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{81} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{81} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \uparrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{81} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \rangle + \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \uparrow \rangle}_{0} \right\rangle$$

$$H_{81} = -\frac{1}{\sqrt{3}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \uparrow | P_x | S \uparrow \rangle + -\frac{1}{\sqrt{3}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle Y \uparrow | P_y | S \uparrow \rangle$$

$$H_{81} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \hbar k_x P - \frac{1}{\sqrt{3}} (i) \hbar k_y P$$

$$H_{81} = -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_+ \text{ elde edilir.}$$

$$H_{82} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| -\sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |X + iY \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{83} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} |X + iY \uparrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{84} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |X + iY \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{85} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| iS \downarrow \rangle = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{85} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k=0) \right| iS \downarrow \rangle}_{0} + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| W(k) \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{85} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{85} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \rangle}_{0} + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar k \cdot P}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{85} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_z}{m_0} (i) \langle Z \downarrow | P_z | S \downarrow \rangle$$

$$H_{85} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z \text{ elde edilir.}$$

$$H_{86} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} |X - iY \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{87} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} |X - iY \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{88} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{3}} |X - iY \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

EK-2 Luttinger modeli için elde edilen Hamiltoniannın matris elemanlarının bulunması

Tablo 2. 1.'deki atomik baz durumlarını kullanarak $(\tilde{W} - W)$ matrisinin elemanları aşağıdaki ara işlemler yapılarak bulunur.

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{11} &= \langle iS \uparrow | \tilde{W} - W | iS \uparrow \rangle = \langle S | \tilde{W} - W | S \rangle = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle S | P | v \rangle \langle v | P | S \rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} k^2 \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle S | P | v \rangle \langle v | P | S \rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle S | P_x | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} \right) \end{aligned}$$

Bu ifadeyi yazarken $|\langle S | P_x | v \rangle|^2 = |\langle S | P_y | v \rangle|^2 = |\langle S | P_z | v \rangle|^2$ özelliğini kullandık.

$$\frac{2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle S | P_x | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \text{ tanımını yaparsak,}$$

$$(\tilde{W} - W)_{11} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \right) \text{ elde ederiz. Yine benzer şekilde}$$

$$(\tilde{W} - W)_{55} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \right) \text{ olduğunu aşikârdır. Matrisin 1 ve 5 satırının bu}$$

elemanlar haricindeki bütün terimleri sıfırdır.

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{22} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X + iY) \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow | \tilde{W} - W - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow \right\rangle + \left\langle \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W - \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow \right\rangle \\ &= \frac{2}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{6} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \downarrow \rangle \\ &= \frac{2}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle + \frac{1}{6} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\ &= \frac{2}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{6} \{ Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2) + Rk_y^2 + S(k_x^2 + k_z^2) \} \\ &= \frac{2}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{6} \{ Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2) + Rk_y^2 + S(k_x^2 + k_z^2) \} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{6}(R+5S)(k_x^2 + k_y^2) + \frac{1}{3}(2R+S)k_z^2$$

elde edilir. Şimdi aşağıdaki yapacağımız tanımlarla,

$$F(k) = Ak^2 + \frac{B}{2}(k^2 - 3k_z^2)$$

$$G(k) = Ak^2 - \frac{B}{2}(k^2 - 3k_z^2)$$

$$H(k) = -iDk_z(k_x - ik_y)$$

$$I(k) = \frac{\sqrt{3}}{2}B(k_x^2 - k_y^2) - iDk_x k_y$$

$$A = \frac{L+2M}{3}, B = \frac{L-M}{3}, C = D^2 - 3B^2, D = \frac{N}{\sqrt{3}}$$

burada,

$$L = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X | P_x | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X | P_y | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

$$N = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle X | P_x | v \rangle \langle v | P_y | Y \rangle + \langle X | P_y | v \rangle \langle v | P_x | Y \rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

dir. Bu tanımlardan sonra

$$(\tilde{W} - W)_{22} = G(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ elde edilir.}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{33} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X+iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X+iY) \uparrow \rangle \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\ &= \frac{1}{2} (R+S)(k_x^2 + k_y^2) + Sk_z^2 = F(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{44} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{3}} | (X+iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \uparrow \rangle \right\rangle \\ &= \frac{1}{3} \langle (X+iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X+iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} + \frac{1}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle \\
&= \frac{1}{3} \{ (R + 2S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2 + Rk_z^2 \} = \frac{1}{2} (F(k) - G(k)) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
\end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{55} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \right)$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{66} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{6} \langle (X - iY) \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{2}{3} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{6} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} + \frac{2}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle \\
&= \frac{2}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{6} \{ Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2) + Rk_y^2 + S(k_x^2 + k_z^2) \} \\
&= \frac{1}{6} (R + 5S)(k_x^2 + k_y^2) + \frac{1}{3} (2R + S)k_z^2 \\
&= G(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{77} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY) \downarrow | \tilde{W} - W | \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{2} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\
&= \frac{1}{2} (R + S)(k_x^2 + k_y^2) + Sk_z^2 = F(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{88} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} + \frac{1}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{3} \left\{ (R + 2S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2 + Rk_z^2 \right\} = \frac{1}{2} (F(k) - G(k)) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

Şimdi de diyagonal olmayan elemanları bulacak olursak,

$$(\tilde{W} - W)_{21} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \right| \tilde{W} - W | iS \uparrow \rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{12} \text{ dir.}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{23} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \right| \tilde{W} - W \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \uparrow \rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \right\} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \{ Tk_x k_z + iTk_y k_z \} = -\frac{1}{\sqrt{3}} Tk_z (k_x + ik_y) = iH^* \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{23} = iH^* \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{32} = -iH$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{24} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \right| \tilde{W} - W \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \left[(X + iY) \downarrow + Z \uparrow \right] \right\rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{3\sqrt{2}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \downarrow \rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle + \frac{1}{3\sqrt{2}} \left\{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \right\} \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{3\sqrt{2}} ((R + S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{24} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{42} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F)$$

$$(\tilde{W} - W)_{25} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \right| \tilde{W} - W | iS \downarrow \rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{52}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{26} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle - \frac{1}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{3} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle - \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} = 0
\end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{26} = 0 \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{62} = 0$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{27} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \right\rangle \\
&= \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{2\sqrt{3}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{3}} (R - S)(k_x^2 - k_y^2) - \frac{1}{\sqrt{3}} T k_x k_y = I
\end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{27} = I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{62} = I^*$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{28} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= \frac{\sqrt{2}}{3} (\langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle) + \frac{1}{2\sqrt{3}} (\langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle) \\
&= i\sqrt{\frac{3}{2}} H
\end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{28} = i\sqrt{\frac{3}{2}} H \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{82} = -i\sqrt{\frac{3}{2}} H^*$$

$$(\tilde{W} - W)_{31} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| iS \uparrow \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{13}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{34} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ Tk_x k_z + iTk_y k_z \} = \frac{1}{\sqrt{6}} Tk_z (k_x + ik_y) = \frac{i}{\sqrt{2}} H
\end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{34} = \frac{i}{\sqrt{2}} H \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{43} = -\frac{i}{\sqrt{2}} H^*$$

$$(\tilde{W} - W)_{35} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{53}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{36} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \uparrow - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{12}} \langle (X + iY) \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{12}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\
&= -\frac{1}{2\sqrt{3}} (R - S)(k_x^2 - k_y^2) + \frac{1}{\sqrt{3}} Tk_x k_y = -I
\end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{36} = -I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{63} = -I^*$$

$$(\tilde{W} - W)_{37} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{73}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{38} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| -\frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) | \tilde{W} - W | (X - iY) \rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle (X + iY) | \tilde{W} - W | (X - iY) \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \}
\end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle (X + iY) | \tilde{W} - W | (X - iY) \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}} (R - S)(k_x^2 - k_y^2) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} T k_x k_y = -\sqrt{2} I$$

$$(\tilde{W} - W)_{38} = -\sqrt{2} I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{83} = -\sqrt{2} I^*$$

$$(\tilde{W} - W)_{46} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \right\rangle$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle - \frac{1}{3\sqrt{2}} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= -i \sqrt{\frac{2}{3}} H$$

$$(\tilde{W} - W)_{46} = -i \sqrt{\frac{2}{3}} H \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{64} = i \sqrt{\frac{2}{3}} H^*$$

$$(\tilde{W} - W)_{47} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY) \downarrow | \right\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \downarrow \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}} (R - S)(k_x^2 - k_y^2) - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} T k_x k_y = \sqrt{2} I$$

$$(\tilde{W} - W)_{47} = \sqrt{2} I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{74} = \sqrt{2} I^*$$

$$(\tilde{W} - W)_{48} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \right\rangle$$

$$= \frac{1}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle - \frac{1}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle$$

$$= \frac{1}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} - \frac{1}{3} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \} = 0$$

$$(\tilde{W} - W)_{48} = 0 \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{84} = 0$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{67} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \downarrow \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\ &= -iH \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{67} = iH \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{76} = -iH^*$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{68} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \langle (X - iY \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle - \frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} - \frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) \frac{1}{3\sqrt{2}} ((R + S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{68} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{86} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{78} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow | \tilde{W} - W | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}} H^* \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{78} = -\frac{i}{\sqrt{2}} H^* \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{87} = \frac{i}{\sqrt{2}} H$$

Ek-3 Etkin kütle yaklaşımı için gerekli ara işlemler

İlk önce dalga denkleminin sol tarafını çözelim. Kinetik enerjinin düzlemsel bileşeninden işe başlayalım,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) (p_\perp)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\ & \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r + \\ & + \frac{2\hbar}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) \vec{k}_\perp \cdot \vec{p}_\perp u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r \\ & + \frac{1}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (p_\perp)^2 u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r \end{aligned}$$

χ_c zarf fonksiyonunun birim hücre skalası üzerinde yavaş değiştiğini kabul ederek integrali hesaplayalım.

$$\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \sum_i \chi_c^{*(A,B)}(z_i) \chi_c^{(A,B)}(z_i) \int_{\Omega_i} u_{c0}^*(\vec{r}) u_{c0}(\vec{r}) d^3r$$

Atomik Bloch durumlarının normalizasyonunu kullanarak,

$$\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \sum_i \chi_c^{*(A,B)}(z_i) \chi_c^{(A,B)}(z_i) \int_{\Omega_i} u_{c0}^*(\vec{r}) u_{c0}(\vec{r}) d^3r = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \sum_i \chi_c^{*(A,B)}(z_i) \chi_c^{(A,B)}(z_i) \Omega_i$$

elde ederiz. χ_c zarf fonksiyonunun birim hücre skalası üzerinde yavaş değiştiği gerçeğini tekrar kullanarak toplam ifadesini bir integrale dönüştürürsek,

$$\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) d^3r = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} S \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz$$

elde edilmiş olur. Bu benzer prosedürü düzlemsel kinetik enerjinin diğer terimlerine de uygularsak,

$$\begin{aligned} & \frac{2\hbar}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) \vec{k}_\perp \cdot \vec{p}_\perp u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\ & \frac{\hbar}{m_0} \left(\int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \right) \vec{k}_\perp \cdot \int_{\text{hücre}} u_{c0}^*(\vec{r}) \vec{p}_\perp u_{c0}(\vec{r}) d^3r \\ & \frac{1}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (p_\perp)^2 u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\ & \frac{1}{2m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \int_{\text{hücre}} u_{c0}^*(\vec{r}) (p_\perp)^2 u_{c0}(\vec{r}) d^3r \end{aligned}$$

elde etmiş oluruz. Kinetik enerjinin z bileşenini için,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) (p_z)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[(p_z^2 \chi_c^{(A,B)}(z)) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{2}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[p_z \chi_c^{(A,B)}(z) p_z u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (p_z)^2 u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r \end{aligned}$$

Yukarıdaki prosedür yardımıyla,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) (p_z)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{2m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) (p_z)^2 \chi_c^{(A,B)}(z) dz + \\ & \frac{1}{m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) p_z \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \int_{\text{hücre}} u_{c0}^*(\vec{r}) p_z u_{c0}(\vec{r}) d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \int_{\text{hücre}} u_{c0}^*(\vec{r}) (p_z)^2 u_{c0}(\vec{r}) d^3 r \end{aligned}$$

sonucuna ulaşılmış olunur. Potansiyel enerji terimi de,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) V_{AB}(r) \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[V_{AB}(\vec{r}) \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r \end{aligned}$$

Yukarıda elde edilen denklemler birleştirilirse

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[V_{AB}(\vec{r}) \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (p_\perp)^2 u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (p_z)^2 u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}^*(\vec{r}) \left[\frac{1}{2m_0} (p_\perp^2 + p_z^2) + V_{A,B}(\vec{r}) \right] u_{c0}(\vec{r}) d^3 r = \\
& \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}^*(\vec{r}) \left[\epsilon_{c0}^{(A,B)} \right] U_{c0}(\vec{r}) d^3 r = \\
& \epsilon_{c0}^{(A,B)} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \frac{1}{\Omega_0} \int_{\text{hücre}} u_{c0}^*(\vec{r}) u_{c0}(\vec{r}) d^3 r = \\
& \epsilon_{c0}^{(A,B)} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz
\end{aligned}$$

Şimdi dalga denkleminin sol tarafını ele alırsak,

$$\begin{aligned}
& \int_{\text{tümuzay}} u_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) \mathcal{E} \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) u_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\
& \mathcal{E} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz
\end{aligned}$$

Sonuç olarak kinetik ve potansiyel terimini birleştirirsek aşağıdaki rotasyon yardımıyla,

$$\langle l|P|m \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\text{hücre}} U_{l0}^*(r) P U_{m0}(r) d^2 r$$

dalga denklemini,

$$\begin{aligned}
& \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)} \left[\epsilon_{c0}^A Y_A + \epsilon_{c0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle c|P_\perp|c \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle c|P_z|c \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \chi_c^{(A,B)} dz = \\
& \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)} \mathcal{E} \chi_c^{(A,B)} dz
\end{aligned}$$

elde edilir.

Ek-4. Polinom İnterpolasyonu (Ara Değer Bulma)

Bir fonksiyonun sonlu sayıdaki $z_1, z_2, \dots, z_n \in \mathbb{R}$ noktalarında aldığı $f(z_1), f(z_2), \dots, f(z_n)$ değerleri bilinsin (fonksiyonun kendisi bilinmiyor). Bu noktalardan geçen n . dereceden bir tek,

$$U_n(z) = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + \dots + a_n z_n \quad (1)$$

polinomu vardır ($i = 1, 2, \dots, n$ için $U_n(z(i)) = f(z(i))$). $U_n(z)$ polinomu elde edilip bir z noktasındaki $f(z)$ değerinin yerine $U_n(z)$ alınırsa, bilinmeyen $f(z)$ değeri yaklaşık $f(z) \approx \widetilde{f(z)} = U_n(z)$ olarak hesaplanmış olur. Bu yaklaşıma **polinom interpolasyonu** (polinom kullanarak ara değer bulma) denir.

$$\begin{aligned} &(z(1), f(z(1))) \\ &(z(2), f(z(2))) \\ &\dots \\ &(z(n), f(z(n))) \end{aligned} \quad (2)$$

noktalarından geçen n . dereceden

$$U_n(z) = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + \dots + a_n z_n \quad (3)$$

polinomu belirlemek için

$$U_n(z(i)) = f(z(i)) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4)$$

yani,

$$\begin{cases} a_0 + a_1 z_1(1) + a_2 z_2(1) + \dots + a_n z_n(1) = f(z(1)) \\ a_0 + a_1 z_1(2) + a_2 z_2(2) + \dots + a_n z_n(2) = f(z(2)) \\ \vdots \\ a_0 + a_1 z_1(n+1) + a_2 z_2(n+1) + \dots + a_n z_n(n+1) = f(z(n+1)) \end{cases} \quad (5)$$

denklemlerinden $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ katsayılarının belirlenmesi gerekir. Bu lineer denklem sistemi çözülerek bu katsayılar belirlenebilir.

$$\begin{bmatrix} 1 & z_1(1) & z_2(1) & \dots & z_n(1) \\ 1 & z_1(2) & z_2(2) & \dots & z_n(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & z_1(n+1) & z_2(n+1) & \dots & z_n(n+1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(z(1)) \\ f(z(2)) \\ \vdots \\ f(z(n+1)) \end{bmatrix} \quad (6)$$

Denklem sistemindeki

$$A = \begin{bmatrix} 1 & z_1(1) & z_2(1) & \dots & z_n(1) \\ 1 & z_1(2) & z_2(2) & \dots & z_n(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & z_1(n+1) & z_2(n+1) & \dots & z_n(n+1) \end{bmatrix} \quad (7)$$

katsayılar matrisi Vandermonde matrisi olarak bilinir ve singüler değildir. Ancak zayıf koşullu olduğunda sayısal hesaplamalardaki yuvarlatma hatalarından dolayı problemler çıkabilir. İnterpolasyon polinomunu belirlemek için değişik yöntemler geliştirilmiştir.

n. Dereceden Polinom İnterpolasyonu

z_1, z_2, \dots, z_n için fonksiyon değerleri $f(z_1), f(z_2), \dots, f(z_n)$ olsun.

$$(z_1, f(z_1)), (z_2, f(z_2)), \dots, (z_n, f(z_n))$$

noktalarından geçen n. dereceden bir $U_n(z)$ polinomu bulunmak isteniyor. $U_n(z)$ polinomu, herbiri n. dereceden bir polinom olan $L_1(z), L_2(z), \dots, L_n(z)$ polinomları cinsinden,

$$U_n(z) = L_1(z) \cdot f(z_1) + L_2(z) \cdot f(z_2) + \dots + L_n(z) \cdot f(z_n)$$

olarak yazılsın. $U_n(z)$ polinomunun,

$$(z_1, f(z_1)), (z_2, f(z_2)), \dots, (z_n, f(z_n))$$

noktalarından geçmesi için,

$$U_n(z_1) = f(z_1) \Rightarrow L_1(z_1) = 1, L_2(z_1) = 0, L_3(z_1) = 0, \dots, L_n(z_1) = 0$$

$$U_n(z_2) = f(z_2) \Rightarrow L_1(z_2) = 0, L_2(z_2) = 1, L_3(z_2) = 0, \dots, L_n(z_2) = 0$$

$$U_n(z_3) = f(z_3) \Rightarrow L_1(z_3) = 0, L_2(z_3) = 0, L_3(z_3) = 1, L_4(z_3) = 0, \dots, L_n(z_3) = 0$$

...

$$U_n(z_n) = f(z_n) \Rightarrow L_1(z_n) = 0, L_2(z_n) = 0, \dots, L_{n-1}(z_n) = 0, L_n(z_n) = 1$$

yani,

$$L_j(z_i) \begin{cases} 1 & , i=j \\ 0 & , i \neq j \end{cases}$$

olmalı. Buna göre, $L_1(z) = ?$, $L_2(z) = ?$, ..., $L_n(z) = ?$

$L_1(z)$ polinomunu göz önüne alalım. Kendi kökleri z_2, z_3, \dots, z_n cinsinden $L_1(z)$ polinomu,

$$L_1(z) = c(z - z_2)(z - z_3)\dots(z - z_n)$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca, $L_1(z_1) = 1$ olması gerektiğinden,

$$c = \frac{1}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)\dots(z_1 - z_n)}$$

ve

$$L_1(z) = \frac{(z - z_2) \cdot (z - z_3) \dots (z - z_n)}{(z_1 - z_2) \cdot (z_1 - z_3) \dots (z_1 - z_n)}$$

dır.

$L_2(z)$ polinomu, kendi kökleri z_1, z_3, \dots, z_n cinsinden

$$L_2(z) = c_1(z - z_1)(z - z_3)\dots(z - z_n)$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca, $L_2(z_2) = 1$ olması gerektiğinden,

$$c_1 = \frac{1}{(z_2 - z_1)(z_2 - z_3)\dots(z_2 - z_n)}$$

ve

$$L_2(z) = \frac{(z - z_1) \cdot (z - z_3) \dots (z - z_n)}{(z_2 - z_1) \cdot (z_2 - z_3) \dots (z_2 - z_n)}$$

dır.

Benzer düşüncelerle, $L_i(z)$ polinomları

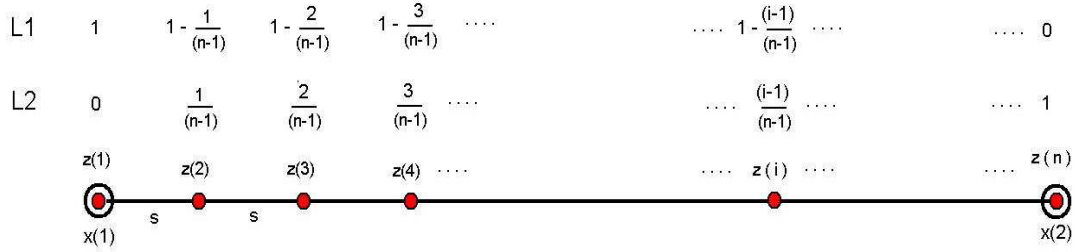
$$L_i(z) = \frac{(z - z_1) \cdot (z - z_2) \dots (z - z_{i-1}) \cdot (z - z_{i+1}) \dots (z - z_n)}{(z_i - z_1) \cdot (z_i - z_2) \dots (z_i - z_{i-1}) \cdot (z_i - z_{i+1}) \dots (z_i - z_n)} = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)}, \quad i=1,2,\dots,n$$

olmak üzere,

$$U_n(z) = \sum_{i=1}^n L_i(z) f(z_i) = \sum_{i=1}^n \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} \right) f(z_i)$$

elde edilir. Bu formül Lagrange formülü olarak bilinir.

1D Yüksek Mertebe Bazlar



Şekil-1. 2 nodlu 1boyutta da bir global element, global element nodları, koordinatları ve alan fonksiyonları

Bir fonksiyonun $z(1), z(2) \in R$ noktalarındaki $f(z(1)), f(z(2))$ değerleri bilinsin (ya da kolay hesaplanabilsin). $z(1) < z < z(2)$ olmak üzere, z bir ara değer olsun ve $f(z)$ bilinmesin (kolay hesaplanamasın). $f(z)$ değerini birinci derece polinom interpolasyonu ile hesaplamaya çalışalım.

$$\begin{aligned} & (z(1), f(z(1))) \\ & (z(2), f(z(2))) \end{aligned} \quad (8)$$

noktalarından geçen polinom denklemi,

$$U_1(z(i)) = a_0 + a_1 z_1(i) \quad (9)$$

dir.

$$U_1(z(i)) = f(z(i)), \quad i = 1, 2 \quad (10)$$

yani,

$$\begin{cases} a_0 + a_1 z(1) = f(z(1)) \\ a_0 + a_1 z(2) = f(z(2)) \end{cases} \quad (11)$$

denklem sisteminden a_0, a_1 katsayılarının belirlenmesi gerekir. Bu lineer denklem sistemi çözülerek bu katsayılar belirlenebilir.

$$\begin{bmatrix} 1 & z(1) \\ 1 & z(2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(z(1)) \\ f(z(2)) \end{bmatrix} \quad (12)$$

denklem sistemindeki

$$A = \begin{bmatrix} 1 & z(1) \\ 1 & z(2) \end{bmatrix} \quad (13)$$

katsayılar matrisinin tersini alıp soldan denk(13)'ün her iki tarafı ile çarparsak a_0, a_1 katsayılarını belirleyebiliriz.

$$\begin{bmatrix} \frac{z(2)}{z(2)-z(1)} & \frac{-z(1)}{z(2)-z(1)} \\ \frac{-1}{z(2)-z(1)} & \frac{1}{z(2)-z(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & z(1) \\ 1 & z(2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{z(2)}{z(2)-z(1)} & \frac{-z(1)}{z(2)-z(1)} \\ \frac{-1}{z(2)-z(1)} & \frac{1}{z(2)-z(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(z(1)) \\ f(z(2)) \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{z(2)f(z(1))}{z(2)-z(1)} + \frac{-z(1)f(z(2))}{z(2)-z(1)} \\ \frac{-1f(z(1))}{z(2)-z(1)} + \frac{1f(z(2))}{z(2)-z(1)} \end{bmatrix} \quad (15)$$

katsayıları elde edilmiş olur. Bu katsayıları denk(9) yerine yazarsak,

$$U_1(z) = \frac{z-z(2)}{z(1)-z(2)} \cdot f(z(1)) + \frac{z-z(1)}{z(2)-z(1)} \cdot f(z(2)) \quad (16)$$

biçiminde elde edilir. Dikkat edilirse $U_1(z)$ polinomu

$$L_1(z) = \frac{z-z(2)}{z(1)-z(2)} = -\frac{z(2)}{z(1)-z(2)} + \frac{1}{z(1)-z(2)} z \quad (17)$$

ve

$$L_2(z) = \frac{z-z(1)}{z(2)-z(1)} = -\frac{z(1)}{z(2)-z(1)} + \frac{1}{z(2)-z(1)} z \quad (18)$$

alan fonksiyonları cinsinden,

$$U_1(z) = L_1(z) \cdot f(z(1)) + L_2(z) \cdot f(z(2)) \quad (19)$$

olarak yazılabilir. $L_1(z), L_2(z)$ fonksiyonları için

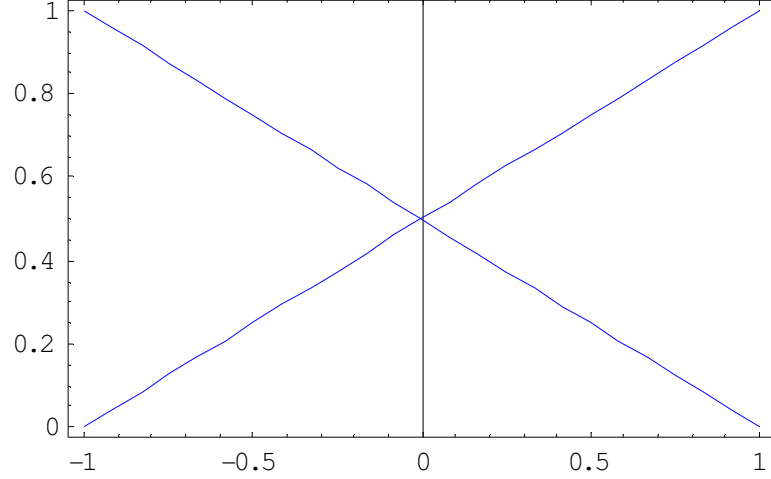
$$L_1(z(1)) = 1, L_1(z(2)) = 0 \quad (20)$$

$$L_2(z(1)) = 0, L_2(z(2)) = 1 \quad (21)$$

dır. Biçim fonksiyonları ise,

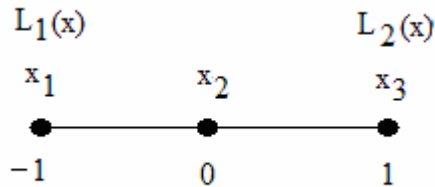
$$\begin{aligned}\phi_1(z) &= L_1(z) \\ \phi_2(z) &= L_2(z)\end{aligned}\quad (22)$$

dir.



Şekil-2. Uzunluğunun bir birime bölünmesiyle (G.E.N.S.=2) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu

Yine bir boyutta global elementteki nod sayısının 3 olduğu bir uzaydaki şekil fonksiyonlarını bulalım. Kolaylık olsun diye global elementi eşit aralıklara bölerek işlem yapıyoruz.



Şekil-3. 1 boyutta 3 nodlu bir global element

Şekil fonksiyonlarını bulacak olursak,

$$\phi_1(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_2)(z - z_3)}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)} = \frac{1}{2}(z)(z - 1) \quad (23)$$

elde edilir. $\phi_1(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_1(x)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_1(z) = 2L_1(z)\left(L_1(z) - \frac{1}{2}\right) \quad (24)$$

olarak elde edilir.

$$\phi_2(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_3)}{(z_2 - z_1)(z_2 - z_3)} = -(z+1)(z-1) \quad (25)$$

$\phi_2(z)$ şekil fonksiyonu hem $L_1(z)$ hem de $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_1(z) = 4L_1(z)L_2(z) \quad (26)$$

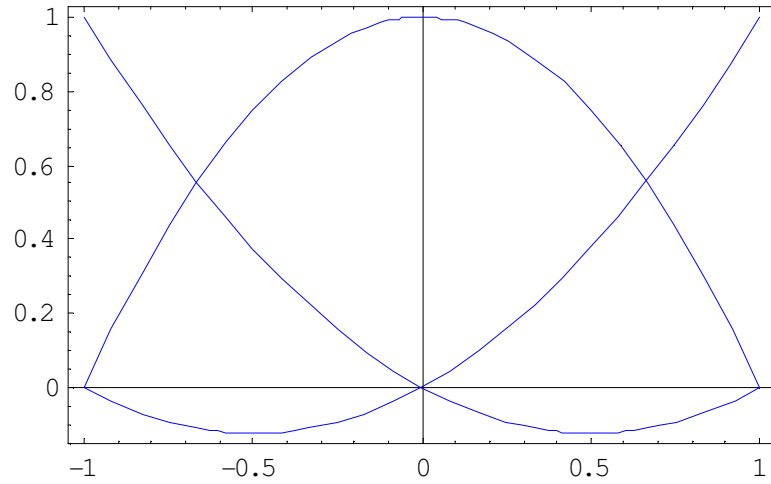
olarak elde edilir.

$$\phi_3(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_2)}{(z_3 - z_1)(z_3 - z_2)} = \frac{1}{2}(z)(z+1) \quad (27)$$

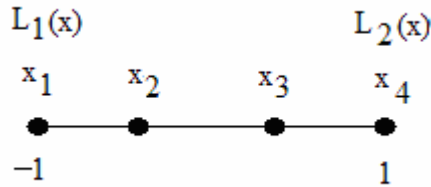
$\phi_3(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_3(z) = 2L_2(z)(L_2(z) - \frac{1}{2}) \quad (28)$$

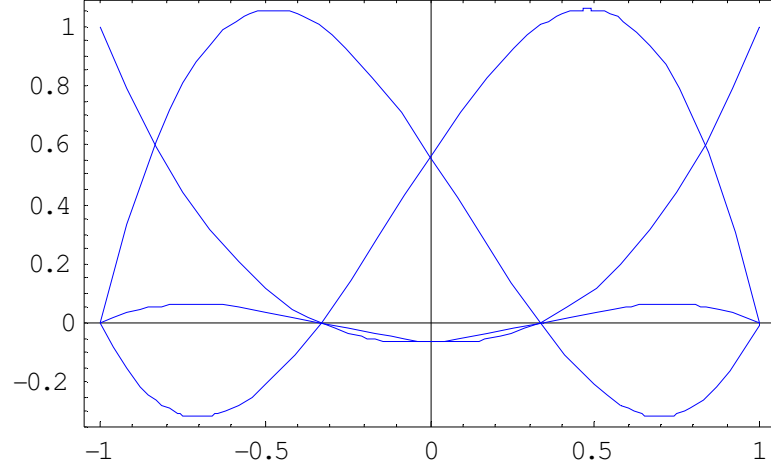
olarak elde edilir.



Şekil-4. Uzayın ikiye bölünmesi ile (G.E.N.S.=3) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu



Şekil-5. 1 boyutta 4 nodlu bir global element



Şekil-6. Uzayın ikiye bölünmesi ile (G.E.N.S.=4) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu

Şekil fonksiyonlarını bulacak olursak,

$$\phi_1(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_2)(z - z_3)(z - z_4)}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)} \quad (29)$$

elde edilir. $\phi_1(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_1(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_1(z) = \frac{9}{2} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{3} \right) \left(L_1(z) - \frac{2}{3} \right) \quad (30)$$

olarak elde edilir.

$$\phi_2(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_3)(z - z_4)}{(z_2 - z_1)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)} \quad (31)$$

$\phi_2(z)$ şekil fonksiyonu hem $L_1(z)$ hem de $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_2(z) = \frac{27}{2} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{3} \right) L_2(z) \quad (32)$$

olarak elde edilir.

$$\phi_3(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_2)(z - z_4)}{(z_3 - z_1)(z_3 - z_2)(z_3 - z_4)} \quad (33)$$

$\phi_3(z)$ şekil fonksiyonu hem $L_1(z)$ hem de $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_3(z) = \frac{27}{2} L_1(z) \left(L_2(z) - \frac{1}{3} \right) L_2(z) \quad (34)$$

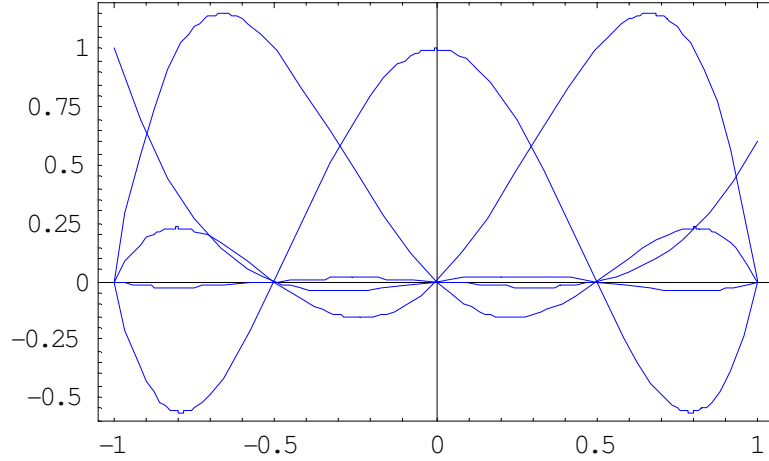
olarak elde edilir.

$$\phi_4(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_2)(z - z_3)}{(z_4 - z_1)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3)} \quad (35)$$

$\phi_4(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$\phi_4(z) = \frac{9}{2} L_2(z) (L_2(z) - \frac{1}{3}) (L_2(z) - \frac{2}{3}) \quad (36)$$

olarak elde edilir.



Şekil-7. Uzayın ikiye bölünmesi ile (G.E.N.S.=5) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu

$$\begin{aligned} \phi_1(z) &= \frac{64}{6} L_1(z) (L_1(z) - \frac{1}{4}) (L_1(z) - \frac{2}{4}) (L_1(z) - \frac{3}{4}) \\ \phi_2(z) &= \frac{64.4}{6} L_1(z) (L_1(z) - \frac{1}{4}) (L_1(z) - \frac{2}{4}) L_2(z) \\ \phi_3(z) &= \frac{64.4}{6} L_1(z) (L_1(z) - \frac{1}{4}) (L_2(z) - \frac{1}{4}) L_2(z) \\ \phi_4(z) &= \frac{64.4}{6} L_1(z) (L_2(z) - \frac{1}{4}) (L_2(z) - \frac{2}{4}) L_2(z) \\ \phi_5(z) &= \frac{64}{6} L_2(z) (L_2(z) - \frac{1}{4}) (L_2(z) - \frac{2}{4}) (L_2(z) - \frac{3}{4}) \end{aligned} \quad (37)$$

şeklinde elde edilmiş olur.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel bilgiler

Adı Soyadı	Ünal YEŞİLGÜL
Doğum Yeri ve Tarihi	Sivas, 17/02/1975
Medeni Hali	Evli
Yabancı Dil	İngilizce
İletişim Adresi	Cumhuriyet Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 58140-Sivas/Türkiye
E-posta Adresi	uyesilgul@cumhuriyet.edu.tr

Eğitim Durumu

Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi , (1994–1998)
Yüksek Lisans	C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı (2001–2004). Tez Konusu: Magneto-Donor Sisteminin Nanoyapılardaki Elektronik ve Optik Özelliklerinin Alan Altındaki Davranışı
Doktora	C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı (2006–2010). Tez Konusu: GaInNAs/GaAs Kuantum Kuyularında Ekzitonik Yapının Yoğun Lazer Alanı Altındaki Davranışı

Akademik Görevler

Cumhuriyet Üniversitesi Araştırma görevlisi, 2001-

Katıldığı Bilimsel Toplantılar

- 1- “Kuantum Tellerinde Donar Safsızlık Atomlarının Magnetik Alan Altındaki Fotoiyonizasyon Tesir Kesiti” U. Yesilgul, H. Sari, E. Kasapoğlu, İ. Sökmen, 10. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, 14 Kasım 2003 Hacettepe Üniversitesi, ANKARA.
- 2- “The effect of hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of impurities in quantum-well wire under the electric field” U. Yesilgul, E. Kasapoğlu, H. Sari, İ. Sökmen, International conference on superlattices, nano-structures and nano-devices 30 Temmuz-04 Ağustos İstanbul 2006
- 3- 11–14 Haziran 2007 Nano TR3 Nanoscience and Nanotechnology 2007, Bilkent, ANKARA
- 4- “Fotonik malzemeler ve Aygıtlar Lisansüstü Yaz Okulu” 19–23 Mayıs 2008, Cumhuriyet Üniversitesi, SİVAS
- 5- “Güneş Gözelerinin Fiziği ve Teknolojisi Lisansüstü Yaz Okulu” 17–21 Mayıs 2010, Cumhuriyet Üniversitesi, SİVAS
- 6- “Effect of the intense laser field on the exciton binding energy in $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ quantum wells” E-MRS June 7-11 2010 Strasburg France.
- 7- “Investigation of the band structure of $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ single quantum well with 10- band **k.p** model” E-MRS June 7-11 2010 Strasburg France.

Yayınlar

- 1- H. Sarı, İ. Sökmen and U. Yesilgul, “Photoionization of donor impurities in quantum wires in a magnetic field” J. Phys. D: Appl. Phys. **37** (2004) 1–4.
- 2- E. Kasapoglu, H. Sarı, U. Yesilgul and İ. Sökmen, “The photoionization cross-section and binding energy of impurities in quantum wires: effects of the electric and magnetic field.” Surface Review and Letters, Vol. 11, No. 4 (2004) 1-7.
- 3- E. Kasapoglu, H. Sarı, U. Yesilgul and İ. Sökmen, “The effect of hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of impurity quantum well-wire under the electric field” Physica B 368 (2005) 76-81.
- 4- E. Kasapoglu, H. Sarı, U. Yesilgul and İ. Sökmen, “The effect of intense

laser field on the photoionization cross-section and binding energy of shallow donor impurities in graded quantum-well wire under an electric field” J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) 6263–6271.

- 5- E. Kasapoglu, H. Sarı, U. Yesilgul and İ. Sökmen, “The electric field dependence of the photoionization cross-section of shallow donor impurities in quantum dot: infinite and finite model” Surface Review and Letters, Vol. 13 No. 6 (2006) 747-752.
- 6- U. Yesilgul, S. Sakiroglu, E. Kasapoglu, H. Sarı, and İ. Sökmen, “The effects of temperature and hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of impurities in quantum-well wire” Superlattices and Microstructures 48(2010) 106-113.
- 7- F. Urgan, U. Yesilgul, S. Sakiroglu, E. Kasapoglu, H. Sarı, İ. Sökmen,” Effects of an intense, high-frequency laser field on the intersubband transitions and impurity binding energy in semiconductor quantum wells” Phys. Lett. A 374(2010) 2980-2984.

Projeler

- 1- “Magneto-Donor Sisteminin Nanoyapılardaki Elektronik ve Optik Özelliklerinin Alan Altındaki Davranışı” Cumhuriyet Araştırma Fon Saymanlığı (F-139) Yardımcı Araştırmacı, 2004.
- 2- “GaInNAs/GaAs Kuantum Kuyularında Eksitonik Yapının Yoğun Lazer Alanı Altındaki Davranışı” Cumhuriyet Araştırma Fon Saymanlığı (F-239) Yardımcı Araştırmacı, 2010.