

YOĐUN LAZER ALANI ALTINDA GaInNAs/GaAs
KUANTUM KUYULARINDAKİ DONOR SAFSIZLIK
ATOMLARININ BAĐLANMA ENERJİLERİ

FATİH UNGAN

DOKTORA TEZİ
KATIHAL FİZİĐİ ANABİLİM DALI
2010

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YOĞUN LAZER ALANI ALTINDA GaInNAs/GaAs KUANTUM
KUYULARINDAKİ DONOR SAFSIZLIK ATOMLARININ
BAĞLANMA ENERJİLERİ

FATİH UNGAN

DOKTORA TEZİ

KATIHAL FİZİĞİ ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI
PROF. DR. ESİN KASAPOĞLU

SİVAS
2010

Bu çalışma Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanmış ve jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan	Prof. Dr. Bilal TANATAR	_____
Üye	Prof. Dr. İsmail SÖKMEN	_____
Üye	Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ	_____
Üye	Prof. Dr. Hüseyin SARI	_____
Üye (Danışman)	Prof. Dr. Esin KASAPOĞLU	_____

ONAY

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

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.

Çalışmalarım sırasında sevgi ve desteğini esirgemeyen aileme ve anneme...

ÖZET

YOĞUN LAZER ALANI ALTINDA GaInNAs/GaAs KUANTUM KUYULARINDAKİ DONOR SAFSIZLIK ATOMLARININ BAĞLANMA ENERJİLERİ

Fatih UNGAN

Doktora Tezi, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Esin KASAPOĞLU

2010, 136 sayfa

Bu çalışmanın ilk aşamasında külçe yarıiletkenler için **k.p** teorisi 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 tek 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 tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomlarının bağlanma enerjileri üzerine kuyu genişliği, azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi incelenmiştir. Son olarak da, farklı azot ve indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun potansiyel profilleri, alt bant enerjileri ve donör safsızlık bağlanma enerjileri üzerine yoğun lazer alanının etkisi hesaplanmıştır.

Anahtar kelimeler: Kuantum kuyusu, çoklu bant etkin kütle teorisi (**k.p** teorisi), sonlu elemanlar yöntemi (FEM), Safsızlık bağlanma enerjisi, Yoğun Lazer Alanı

ABSTRACT

THE BINDING ENERGIES OF DONOR IMPURITIES IN GaInNAs/GaAs QUANTUM WELLS UNDER THE INTENSE LASER FIELD

Fatih UNGAN

PhD Dissertation, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Esin KASAPOĞLU

2010, 136 pages

In the first stage of this study, general information about **k.p** theory for bulk semiconductors presented. In the second stage, the band structure of semiconductor quantum wells defined with 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 band structure of a single $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well is calculated with finite element method. Then, the effects of well width, nitrogen and indium concentrations on the binding energies of donor impurities in a single $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well are investigated. Finally, the effect of intense laser field on the potential profile, sub-band energy and the binding energy of donor impurity a single $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well is calculated.

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. Esin KASAPOĞLU'na 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. Hüseyin SARI'ya müteşekkirim.

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

Bana her konuda sabırları ve sevgileri ile yardımcı olan sevgili eşim Aysun ÖZALTUĞ UNGAN ve oğlum Tunay Mert UNGAN'a ve 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 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ TEORİSİ	4
2.1 Kane Teorisi ve Luttinger-Kohn Modeli	8
2.1.1 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Yaklaşımının Genelleştirilmesi	8
2.1.2 J-J Çiftlenimli Atomik Bloch Seviyeleri	8
2.1.3 Ayrık Bantlarla Çiftlenim (Luttinger-Kohn Modeli)	15
2.2 Seyreltik III-N-V Yarıiletkenler.....	29
2.3 Bant Anti-Crossing (BAC) Yaklaşımı	30
2.4 III-N-V Külçe Yarıiletkenler için 6+4 bant $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Teorisi.....	33
3 ZARF FONKSİYONU YAKLAŞIMI	38
3.1 İletim Bandı	40
3.2 Çiftlenimli Bantlar ve Zarf Dalga Fonksiyonu	44
3.3 III-N-V Yarıiletken Kuantum Kuyularının Bant Yapısı	48
4 SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ (FEM)	52
4.1 Baz Fonksiyonlarının Seçimi	55
4.2 FEM'in Çiftlenimli Bantlara Uygulanması	56
5 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK VE VALANS BANDI YAPISI.....	66
6 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ TEK KUANTUM KUYUSUNUNDAKİ DONOR SAFSIZLIKLARININ BAĞLANMA ENERJİLERİ.....	77
7 YOĞUN LAZER ALANI (IFL) ALTINDAKİ $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN ELEKTRONİK YAPISI	83
7.1 Yüksek Frekanslı Yoğun Lazer Alanı Altındaki Kuantum Kuyusundaki Elektronlar..	85
7.2 Yoğun Lazer Alanı Altındaki $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ Tek Kuantum Kuyusunun Potansiyel Profilleri ve Altbant Enerjileri.....	88
7.3 Yoğun Lazer Alanı Altındaki $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ Tek Kuantum Kuyusundaki Donor Safsızlıklarının Bağlanma Enerjileri	95
8 SONUÇLAR	99
KAYNAKLAR.....	102

EKLER

EK-1 Kane Modeli İçin Elde Edilen Hamiltonian Matris Elemanlarının Bulunması	107
EK-2 Polinom İnterpolasyonu ve Lagrange Polinomlarının Elde Edilmesi	123
ÖZGEÇMİŞ.....	133

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	BAC modeli kullanarak GaInNAs şematik bant yapısı	32
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	Çiftlenimli bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması	58
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	69
Şekil 5.2	Farklı azot konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.....	70
Şekil 5.3	Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.....	72
Şekil 5.4	Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi...	73
Şekil 5.5	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 5.6	Farklı kuyu genişlikleri için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.....	76
Şekil 6.1	GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun şematik gösterimi.....	77
Şekil 6.2	Farklı azot konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.....	81
Şekil 6.3	Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.....	82
Şekil 7.1	$Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyelinin (a) azot (b) indiyum konsantrasyonlarına göre değişimi	89
Şekil 7.2	$Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi (a) $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$	91
Şekil 7.3	$Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs tek kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi (a) $\alpha_0 = 100 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$	92

Şekil 7.4 $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusunun α_0 'ın fonksiyonu olarak enerji seviyelerin değişimi	94
Şekil 7.5 $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı (a) Azot ve (b) İndiyum konsantrasyonlarında α_0 'a göre değişimi.....	96
Şekil 7.6 $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusundaki kuyu kenarındaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı (a) Azot ve (b) İndiyum konsantrasyonlarında α_0 'a göre değişimi.....	97

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 2.1	Atomik Bloch Saviyeleri.....	9
Tablo 2.2	Kane Hamiltoniyeni.....	11
Tablo 2.3	$\tilde{W} - W$ matris temsili	26
Tablo 2.4	Luttinger-Kohn Hamiltoniyenin matris temsili.....	28
Tablo 2.5	Atomik Bloch Saviyeleri.....	33
Tablo 2.6	Atomik Bloch Saviyeleri.....	35
Tablo 2.7	Bant yapısı hesaplamalarında kullanılan ikili bileşikler için parametreler	36
Tablo 5.1	Hesaplamalarda kullanılan GaAs, InGa, GaN, InN materyal parametreleri	67
Tablo 5.2	Hesaplamalarda kullanılan bükülme (Bowling) parametreleri (eV)	67

1.Giriş

Yarıiletkenler günümüz teknolojisinde çok yaygın bir kullanım alanına sahip olup birçok elektronik ve opto-elektronik aletlerin temel yapı elemanlarını oluşturarak yaşantımız içinde önemli bir yer tutarlar. Yarıiletken materyallerin elektriksel ve optiksel özelliklerinin dış etkilerle (katılama, elektrik alan, baskı vb.) değiştirilebilir olması, cihaz yapımında tercih nedenidir [1–3]. Yeni elektronik devre elemanlarının geliştirilmesi çoğunlukla düşük boyutlu yarıiletken heteroyapılara dayanmaktadır [4–10]. Yeni cihazlar için önerilen modellerin çalışma ilkeleri elektronik ve optik özelliklerin amaca yönelik ayarlanabilir olmalarına bağlıdır. Bu durum kuantum kuyularının araştırılmasını önemli kılmaktadır.

Son yıllarda kristal büyütme tekniklerindeki (MBE ve MOCVD gibi) hızlı gelişmeler sonucunda yarıiletken heteroyapılara dayanan birçok opto-elektronik devre elemanları geliştirilmiştir. Bu yapılar daha çok örgü sabitleri birbirine yakın III-V grubu yarıiletkenlerin belirli oranlarda katılarak alaşım halinde tabakalar biçiminde büyütülmesi ile elde edilirler. III-V grubu heteroyapıların elektronik ve optik özelliklerinin amaca uygun olarak ayarlanabilirliklerinin sınırlı olması, araştırmacıların yeni arayışlar içinde olmasını zorunlu kılmaktadır. Son zamanlarda yapılan araştırmalarda III-V grubu yarıiletkenlere küçük bir miktar azot (N) katılmasıyla bant aralıklarının büyük bir oranda azaldığı deneysel ve teorik olarak gösterilmiştir [11–16]. III-V yarıiletkenlerin günümüz optik iletişim sistemlerinde kullanılan yarıiletken lazerler için vazgeçilmez olmaları nedeniyle GaAs örgüsü ile uyuşan dörtlü GaInNAs sistemi araştırmacıların ilgi odağı haline gelmiştir [17–18]. Bu yapılar optik haberleşme sistemlerinde veri kaybının minimum olduğu 1.3–1.55 μm dalga boyunda çalışabilecek lazer sistemlerinin yapılmasına olanak sağlar [19].

Seyreltik nitratlara gerçek ilgi, doksanlı yılların ortasında Kondow ve arkadaşlarının dörtlü GaInNAs alaşım üzerine yaptıkları çalışmanın sonuçlarını yayınlamalarından sonra başlamıştır [17–18]. Bu yeni alaşımlar In:Ga ve N:As oranlarının bağımsız kontrollerine izin verir. In:Ga oranındaki artış örgü parametresinde bir artışa ve bant aralığında bir azalmaya neden olur. N:As oranındaki artış ise hem bant aralığında hem de örgü parametresinde azalmaya neden olur. Bu nedenle GaInNAs alaşımı hem bant aralığı hem de örgü parametresinin işlenmesinde esneklik sağlar. Bu işlenebilirlik potansiyeli, mümkün uygulamaların geniş bir aralıkta olmasını sağlar. Bu

nedenle III nitrat grubu alařımlar olduka nemlidir. Bu materyallerin elektronik bant enerjileri arasındaki byk farklılık sebebi ile geniř bir spektrum blgesini kapsayan opto-elektronik aletler tasarlanabilir.

1.3 ve 1.55 μm dalga boylarında ıřıma yapan yarıiletken lazerler optik iletiřim sistemleri iin olduka nemlidir. Bu lazerlerde genellikle GaInAsP-GaP materyal sistemleri kullanılmaktadır [20]. Bu sistemler yksek sıcaklıklarda (25–85 $^{\circ}\text{C}$) dřk performanslara sahiptirler. Bu nedenle optik fiber iletiřim sistemlerinde kullanılmaları iin, genellikle termo-elektrik sođutucular gerekmektedir.

GaAs rgs ile uyuřan drtl GaInNAs sisteminin yukarıdaki problemleri zebileceđi nerilmektedir. GaInAs-GaAs baskılı kuantum kuyusuna azot eklenmesi ile baskı azalır, bant aralıđı klr ve iletim bant sreksizliđi artar. As atomuna gre, elektronegatifliđi daha byk ve atom yarıapı daha kk olan azot atomlarının kristal rgde As atomları ile yer deđiřtirdiđinde, kristalin yerel potansiyelinde oluřturduđu pertrbasyon sistemin bant aralıđının klmesine sebep olur. Azot konsantrasyonunun bant aralıđına kuvvetli etkisi nedeni ile azot ieren alařımlar uzun dalga boylu opto-elektronik aletlerin tasarımlarında tercih edilir. Bu yzden GaInNAs alařımlarının elektronik bant yapısı zerine azot konsantrasyonunun etkisinin tam bir dođrulukla bilinmesi ok nemlidir.

Bilindiđi gibi GaInAs-GaAs matris yarıiletkenine kk bir oranda azot (N) katılmasıyla sistemin elektronik yapısında nemli deđiřiklikler grlr. Bu davranıřın merkezi azot atomlarının dođasında yatar ve azotun etkisi yarıiletkenin rgsnde olur. Azot atomları GaNAs ve GaInNAs' daki s orbital simetrisinde derin bir safsızlık olarak davranır. rg N blgesi civarında bozulur ve GaN bađı ok kısa olması nedeni ile yeniden dzenlenir. Bunun sonucu olarak; yasak bant aralıđı, elektronun etkin ktlesi, bant aralıđı geniřlemesi gibi fiziksel parametrelerde nemli deđiřiklikler oluřur.

Bu yeni malzemeler, temel fiziksel zelliklerindeki ilgin deđiřmeler nedeni ile hem gneř pilleri hem de optiksel iletiřim iin lazer aletlerinde potansiyel olarak kullanılmaktadır. GaInNAs yarıiletken bileřikleri ile elde edilen lazer sistemlerinin diđer lazer yapılara gre bazı avantajları [21],

- İletim bandı kuyusu elektronlar iin yerince kuřatma sađlayacak kadar byktr.
- Elektron etkin ktlesi, iletim ve valans bandındaki durumların daha iyi eřleřmesi sonucu ile daha byktr.
- GaInNAs-GaAs lazerleri, yksek sıcaklık performansı, yksek verimlilik ve ıkıř gcne sahiptirler.

- Yaydıkları dalga boyu kararlılığı sıcaklığın değişmesine rağmen mükemmeldir.
- Çalışma hızları yüksektir.
- GaInNAs-GaAs lazerleri, tek bir epitaksiyel büyütme ile GaAs alttaşı üzerine yüksek yansımali GaAs/AlAs Bragg (DBRs) aynaları üzerine büyütülebilirler, şeklinde sıralanabilir. Yukarıdaki avantajlar nedeniyle bu çalışmada aktif bölgesi GaAs-GaInNAs-GaAs heteroyapısı kuyu bölgesindeki safsızlık atomlarına yoğun lazer alanının etkisi, etkin kütle ve zarf fonksiyonu yaklaşımları altında varyasyonel olarak incelenecektir.

Bölüm 2’de külçe yarıiletkenler için $\vec{k} \cdot \vec{p}$ teorisi hakkında genel bilgiler verilerek, külçe GaInNAs materyalinin elektronik bant yapısı incelenmiştir.

Bölüm 3’de Heteroyapılar için etkin kütle yaklaşımı (zarf fonksiyonu yaklaşımı) özet olarak verilip, GaAs-GaInNAs-GaAs kuantum kuyusunun iletim ve valans alt-bant yapısı için analitik denklemler elde edilmiştir.

Bölüm 4’de GaAs-GaInNAs-GaAs kuantum kuyusunun elektronik bant yapısının sayısal çözümünde kullanılan sonlu elemanlar yöntemi (FEM) hakkında genel bilgiler verilerek, çiftlenimli bantlara bu yöntemin uygulanması için gerekli analitik denklemler elde edilmiştir.

Bölüm 5’de GaAs-GaInNAs-GaAs kuantum kuyu yapısının iletim ve valans alt-bant yapısının; azot konsantrasyonu, indiyum konsantrasyonu ve kuyu genişliği ile değişimi incelenmiştir.

Bölüm 6’de GaAs-GaInNAs-GaAs kuantum kuyu yapısındaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin; azot konsantrasyonu, indiyum konsantrasyonu ve kuyu genişliği ile değişimi incelenmiştir.

Bölüm 7’de GaAs-GaInNAs-GaAs kuantum kuyu yapısının yoğun lazer alanı altında safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin; azot konsantrasyonu, kuyu genişliği ve indiyum konsantrasyonu ile değişimi incelenmiştir.

Bölüm 8’de GaAs-GaInNAs-GaAs kuantum kuyu yapısı sisteminin elektronik ve optik özellikleri için elde edilen sonuçlar verilmiştir. Sonuçların teknoloji ve aygıt tasarımına getireceği katkılar tartışılmıştır.

2. Külçe Yarıiletkenler için $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Teorisi

Bu bölümde, literatürde etkin kütle teorisi olarak isimlendirilen $\vec{k} \cdot \vec{p}$ teorisini inceleyeceğiz [22]. Periyodik bir örgüde hareket eden, serbest bir parçacığı tanımlayan Schrödinger dalga denklemi,

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

ile verilir. Bu denklemdeki $V(r)$, iletkenlik elektronları ve iyonların neden olduğu etkin periyodik potansiyeldir ve

$$V(\vec{r} + \sum_i n_i \vec{a}_i) = V(\vec{r}) \quad , \quad i = x, y, z \quad (2.2)$$

ile verilir. Burada $\sum_i n_i \vec{a}_i$ kristal öteleme vektörüdür. Denk (2.1) deki üçüncü terim

$\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})] \cdot \vec{P}$ spin-orbit etkileşimini, son terim $\delta H(r)$ ise relativistik

etkileşimleri göstermektedir. Çoğu durumda bu relativistik etkileşimler oldukça küçüktür. Bu nedenle diğer terimler yanında ihmal edilir. Periyodik örgüdeki toplam Hamiltoniyen, kristal ötelemeler altında değişmez kalacağından, denk (2.1) 'in çözümleri olan $\psi(r)$ dalga fonksiyonu da bu ötelemeler altında,

$$T_d \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{d}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}} \psi(\vec{r}) \quad (2.3)$$

değişmez kalmalıdır. Burada d , kristal öteleme vektörüdür. Bu koşula göre, dalga fonksiyonu,

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

olan Bloch fonksiyonudur. Burada $U_{nk}(r)$ örgü periyodikliğine sahip,

$$U_{nk}(\vec{r} + \vec{d}) = U_{nk}(\vec{r}) \quad (2.5)$$

atomik Bloch seviyesidir.

Periyodik sınır şartları ve denk (2.3), \vec{k} dalga vektörünün olası değerleri üzerine sınırlamalar koyar.

$$\psi_{nk}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi_{nk}(\vec{r}) \quad (N_i \rightarrow \infty \quad i = x, y, z) \quad (2.6)$$

burada a_i ($i = x, y, z$) ilkel örgü vektörlerdir. Sonuç olarak \vec{k} dalga vektörü,

$$\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i = 2\pi n \quad (n = 1, 2, 3, \dots; i = x, y, z) \quad (2.7)$$

olarak tanımlanır. Denk.(2.4) deki Bloch dalga fonksiyonunu, denk (2.1) de yerine yazıp çözersek,

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

düzenlersek,

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} (-i\hbar \vec{\nabla}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{1}{2m_0} e^{i\vec{k}\vec{r}} (-\hbar^2 \vec{\nabla}^2) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + V(r) \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right) + \\
& \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V] \cdot \vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V] e^{i\vec{k}\vec{r}} (-i\hbar \vec{\nabla}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(k) e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r})
\end{aligned}$$

elde edilir. $\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}$ ve $P^2 = -\hbar^2 \nabla^2$ olduğundan,

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

elde edilir. Yukarıdaki Hamiltoniyeni iki kısma ayırabiliriz.

$$[H(k=0) + W(k)] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(k) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.9)$$

$$\text{burada } H_0 = H(k=0) = \frac{P^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{P}$$

$$\text{ve } W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} (\vec{P} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V)) \text{ dir ve yalnızca } W(k) \vec{k} \text{ dalga vektörüne}$$

bağlıdır. Yerel tek parçacık Hamiltoniyenin $H(k=0)$, U_{n0} özfonksiyonlarının ortogonal bir tam setine sahip olduğunu varsayalım.

$$H(k=0) U_{n0}(r) = \varepsilon_n(0) U_{n0}(r) \quad (2.10)$$

iyi davranışlı sıradan bir örgü periyodik fonksiyonu da, bu U_{n0} özfonksiyonları kullanılarak bir seri açılımı olarak yazılabilir. Biz denk (2.8) 'de

$$U_{nk}(r) = \sum_m c_m^n(k) U_{m0}(r) \quad (2.11)$$

seri açılımını kullanırsak, $c_m^n(k)$ bilinmeyen sabitlerini belirlemek için matris denklemini bulabiliriz. Bu matris denklemini elde etmek için soldan U_{n0}^* ile çarpıp, integral ve baz fonksiyonlarının $\int_{\text{hücre}} U_{n0}^*(r) U_{m0}(r) d^3r = \delta_{nm}$ diklik özelliğini kullanırız.

Bu işlemlerin sonucunda,

$$\sum_m \left[(\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{nk} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}) \delta_{nm} + \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} \langle U_{n0} | (\vec{P} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V)) | U_{m0} \rangle \right] c_m^n(k) = 0 \quad (2.12)$$

denklemini elde ederiz. Burada $H(k=0)U_{n0}(r) = \varepsilon_n(0)U_{n0}(r)$ ifadesini kullandık. Denk (2.12) deki matris denkleminin çözümü, denk (2.8) de ifade edilen dalga denkleminin tam özfonksiyonlarını verir. Ancak bununla beraber \vec{k} 'nın artışı hesaplamalardaki karmaşıklığı artırır. Bu karmaşıklığın ilki, denk (2.11) deki seri açılımındaki durumların sayısını artırır ve hesaplamaları nümerik olarak elde edilemez hale getirir. Bu nedenle genellikle bu yaklaşım sadece küçük \vec{k} dalga vektörü değerleri için pratiktir. Denk (2.12) ifadesinde, kübik örgü periyodik Hamiltoniyeninde $H(k=0)$ bütün m özfonksiyonları için, $\langle U_{m0} | (\vec{P} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V)) | U_{m0} \rangle = 0$ ifadesini kullandık.

Bu lineer momentumun matris elemanları, simetri özelliğinden doğrudan görülebilir. Biz bu çalışmamızda iki yüzey merkezli (fcc) yapının iç içe girmesiyle oluşan zinc-blend örgü yapısına sahip bileşik yarıiletkenleri göz önüne alacağız. Küçük \vec{k} değerlerinde köşegen olmayan terimler küçüktür ve özfonksiyonlar için en düşük dereceli çözümler

$$c_m^n(k) = \delta_{nm} \quad (2.13)$$

ve ilgili özdeğerler

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.14)$$

biçiminde verilir. Eğer köşegen olmayan elemanlar küçükse denk (2.14) ile verilen özdeğer ifadesi ikinci derece pertürbasyon teorisiyle düzeltilir.

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_{n0} + \langle U_{n0} | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | U_{m0} \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle U_{n0} | H_I | U_{m0} \rangle \langle U_{m0} | H_I | U_{n0} \rangle}{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}} \quad (2.15)$$

burada

$$H_I = \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} (\vec{P} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V)) \quad (2.16)$$

dır. Denk(2.15) teki özdeğer ifadesi kuşkusuz bir pertürbasyon olarak

$W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + H_I$ 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 da birinci derece pertürbasyon teorisi için katkısı sıfırdır. İkinci dereceden özenerji,

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \sum_{m \neq n} \frac{|\vec{\pi}_{nm} \cdot \vec{k}|}{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}} \quad (2.17)$$

olarak yazılabilir. Burada,

$$\vec{\pi} = \vec{P} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \quad (2.18)$$

ve $\pi_{nm} = \langle U_{n0} | \pi | U_{m0} \rangle$ dır. \vec{k} vektörü denk (2.17) deki integral dışına alınabilir. Bu da özdeğerlerin, Γ vadisi yakınlarında dalga vektörü bileşenlerine kuadratik olarak bağlı olduğunu gösterir. Denk (2.17) daha sık olarak,

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha\beta} k_\alpha \frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} k_\beta \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (2.19)$$

biçiminde yazılır. Burada,

$$\frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} = \frac{1}{m_0} \delta_{nm} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\pi_{nm} \pi_{mn}}{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}} \quad (2.20)$$

etkin kütle tensörüdür.

2. 1. Kane Teorisi ve Luttinger-Kohn Modeli

2. 1. 1 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ yaklaşımının genelleştirilmesi

- Bir önceki bölümde tartışılan $\vec{k} \cdot \vec{p}$ teorisi aslında pertürbasyon teorisi üzerine kurulmuştur. Kuvvetli bant-bant etkileşimlerini de içermek şartıyla daha uygun bir yaklaşım denk (2.8) i sağlamalıdır.
- Denk(2.8) de baz durumlarının tam bir setini kapsamaması nümerik olarak uygulanabilir değildir. Bununla beraber denk (2.8) deki 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 grupla etkileşen zayıf etkileşimli bantlardır. Bu etkileşme pertürbasyon teori ile çözülebilir.

Bu yaklaşımlar III-V bileşik yarıiletkenler için oldukça iyi sonuçlar verdiği görülür.

2. 1. 2. J-J Çiftlenimli Atomik Bloch Seviyeleri

Şimdi biz önceki bölümde tartıştığımız $|U_{n0}\rangle$ direk orbital atomik Bloch seviyelerinin bir lineer kombinasyonu olarak p-simetrili atomik Bloch seviyelerinin yeni bir baz setini oluşturacağız. 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-simetrili 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 Atomik Bloch Seviyeleri

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

$$H_0 = H(k=0) = \frac{\vec{P}^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{P}$$

Hamiltoniyenin özfonksiyonlarıdır.

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 split-off bandı olarak bilinir. Denk(2.12) deki \vec{k} ya bağlı spin-orbit etkileşim terimini ihmal edersek,

$$\frac{\hbar k}{m_0} \cdot (\vec{\pi} - \vec{P}) = \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} \left(\frac{\hbar}{4m_0c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \right) \quad (2.21)$$

Hamiltoniyenin matris temsili $H(k) = H(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0}$ olacaktır.

$$W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \quad (2.22)$$

olmak üzere Hamiltoniyen

$$H(k) = H(k = 0) + W(k) \quad (2.23)$$

biçiminde yazılır. Bu modelde Hamiltoniyenin matris elemanlarının bulunması için yapılan işlemler **EK-1**'de verilmiştir. Bu sonuçları tablo 2. 2 de gösterirsek.

	$ 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 $	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_+$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$
$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$-\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right $	$P\hbar k_-$	0	$-\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	0	0	0
$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right $	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	$-\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$\langle iS \downarrow $	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_-$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$
$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right $	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$-\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0
$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right $	0	0	0	0	$P\hbar k_+$	0	$-\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0
$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	$-\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

Tablo 2. 2 Kane Hamiltoniyeni

Şimdi tablo 2. 2 deki Hamiltoniyeni daha kolay köşegen hale getirmek için, sistem koordinatını z eksenini olarak seçilir ($k_z = k$ ve $k_{\pm} = 0$). Bu seçim Hamiltoniyenin izotropik olduğu görüldükten sonra mümkündür ve bu nedenle özdeğer ve özvektörler yalnızca \vec{k} 'ın büyüklüğüne bağlıdır. Bu koordinat sisteminde Hamiltoniyen,

$$H = \begin{pmatrix} H_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & H_{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

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

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} P \hbar k_z \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z & \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} P \hbar k_z & 0 & 0 & \varepsilon_0 - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

biçimindedir. Burada $k_z = k$ dir. Enerji özdeğerleri determinantın kökünün bulunmasıyla elde edilir.

$$|H - \varepsilon(k)I| = 0$$

elde edilen enerji özdeğerleri denk (2.12) de yerine yazarak dalga fonksiyonunu elde ederiz. Şimdi bu denklemi çözersek,

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} P \hbar k \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k & \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} P \hbar k & 0 & 0 & \varepsilon_0 - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(k) \\ c_2(k) \\ c_3(k) \\ c_4(k) \end{pmatrix} = \varepsilon(k) \begin{pmatrix} c_1(k) \\ c_2(k) \\ c_3(k) \\ c_4(k) \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Bu denklemi çözmek için, $\varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \lambda(k)$ dersek,

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

Şimdi bu denklemi çözelim.

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

$$\lambda(k)(\lambda(k) + \varepsilon_0)(\lambda(k) + \varepsilon_0 + \Delta) + \sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z [(-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z)(-\lambda(k) - \varepsilon_0)(-\lambda(k) - \varepsilon_0 - \Delta)] - \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z [(\lambda(k) + \varepsilon_0)(\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z)(\lambda(k) + \varepsilon_0)] = 0$$

$$\lambda(k)(\lambda(k) + \varepsilon_0)(\lambda(k) + \varepsilon_0 + \Delta) = (P\hbar k_z)^2 (\lambda(k) + \varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta) \text{ elde edilir.}$$

Şayet k yı çok küçük kabul edersek,

$$\begin{aligned} \lambda(k) = 0 & \Rightarrow \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \\ \lambda(k) = -\varepsilon_0 & \Rightarrow \varepsilon(k) = -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \\ \lambda(k) = -\varepsilon_0 - \Delta & \Rightarrow \varepsilon(k) = -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{aligned}$$

şeklinde elde ederiz. Şimdi sırası ile her banda gelen enerji düzeltmelerini hesaplırsak, Ağır boşluk bandı için,

$$\varepsilon_{hh} = -\varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \Rightarrow \frac{1}{m_{hh}} = \frac{1}{m_0}$$

İletim bandı için,

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

ifadesinde $\lambda(k) = 0 + \varepsilon'$ yazalım. $\varepsilon' \ll \varepsilon_0$ ve $\varepsilon' \ll \Delta$ ise,

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

$$\Rightarrow \varepsilon' = (P\hbar k)^2 \left(\frac{\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \right) \text{ elde edilir. Bu ifadeyi denklemden yerine yazarsak,}$$

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

$$\varepsilon_c = 0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \Rightarrow \frac{1}{m_c} = \left(\frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3\varepsilon_0} + \frac{2P^2}{3\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \right) \text{ elde edilir.}$$

Hafif boşluk bandı için,

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

ifadesinde $\lambda(k) = \varepsilon' - \varepsilon_0$ yazalım. $\varepsilon' \ll \varepsilon_0$ ve $\varepsilon' \ll \Delta$ ise,

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

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

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

Spin-yörünge etkileşim bandı için,

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

ifadesinde $\lambda(k) = \varepsilon' - \varepsilon_0 - \Delta$ yazalım. $\varepsilon' \ll \varepsilon_0$ ve $\varepsilon' \ll \Delta$ ise,

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

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

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

2. 1. 3 Ayrık Bantlarla Çiftlenim (Luttinger-Kohn Modeli) :

Dalga denklemini,

$$(H_0 + W)\psi = \varepsilon\psi \quad (2.27)$$

olarak ele alalım. Burada,

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{P} \quad (2.28)$$

dır. 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 farz edelim. Şimdi ayrık bantların neden olduğu H_0 'ın en düşük 8 özdeğerine gelen düzeltmeyi hesaplayacağız.

Bu düzeltmeyi içeren denklem (2.27) in çözümü olan dalga fonksiyonu,

$$\psi = \sum_l c_l |l\rangle + \sum_v c_v |v\rangle \quad (2.29)$$

şeklindedir. Şimdi bu dalga fonksiyonunu denklem (2.27) de yerine yazarsak,

$$(H_0 + W) \sum_l c_l |l\rangle + \sum_v c_v |v\rangle = \varepsilon \sum_l c_l |l\rangle + \sum_v c_v |v\rangle \quad (2.30)$$

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

$$\sum_l c_l [(\varepsilon_l - \varepsilon) \delta_{lm} + \langle m|W|l\rangle] + \sum_v c_v \langle m|W|v\rangle = 0 \quad (2.31a)$$

elde ederiz. Şimdi de denklem (2.30) soldan zayıf çiftlenimli bir dalga fonksiyonu ile çarparsak,

$$\sum_v c_v [(\varepsilon_v - \varepsilon) \delta_{\mu v} + \langle \mu|W|v\rangle] + \sum_l c_l \langle \mu|W|l\rangle = 0 \quad (2.31b)$$

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 (2.31b) yardımıyla,

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

elde edilir. Elde ettiğimiz bu sonucu denklem (2.31a) yerine yazarsak,

$$\sum_l c_l \left[(\varepsilon_l - \varepsilon) \delta_{lm} + \langle m | W | l \rangle + \langle m | W \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_v} W | l \rangle \right] = 0 \quad (2.32)$$

sonucunu elde ederiz. Ayırık bantların etkisini dalga denkleminde,

$$W \rightarrow \tilde{W} = W + W \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_v} W \quad (2.33)$$

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

$$\text{Öncelikle } \tilde{W} - W = W \sum_v \frac{|v\rangle\langle v|}{\varepsilon - \varepsilon_v} W \text{ operatörünün matris elemanlarını}$$

hesaplamakla işe başlayalım. Ayırık 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 açılmal 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 integralin 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 integralin 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 değiştirdiğimiz de,

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

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,

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k \langle X|P|v\rangle\langle v|P|Z\rangle k}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} &= Tk_x k_z \\ \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k \langle X|P|v\rangle\langle v|P|Y\rangle k}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} &= Tk_x k_y \\ \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{k \langle Y|P|v\rangle\langle v|P|Z\rangle k}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} &= Tk_y k_z \\ T &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle X|P_x|v\rangle\langle v|P_z|Z\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle X|P_x|v\rangle\langle v|P_y|Y\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle Y|P_y|v\rangle\langle v|P_z|Z\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}\end{aligned}$$

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,

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

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. Burada $|\langle X|P_y|v\rangle|^2 = |\langle X|P_z|v\rangle|^2$ 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 Bloch fonksiyonlarını kullanacağız.

$$(\tilde{W} - W)_{11} = \langle iS \uparrow|\tilde{W} - W|iS \uparrow\rangle = \langle S|\tilde{W} - W|S\rangle = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle S|P|v\rangle\langle v|P|S\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} k^2$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{m_0^2} \sum_v \frac{\langle S|P|v\rangle\langle v|P|S\rangle}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle S|P_x|v\rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} \right)$$

elde edilir. 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. $\frac{2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle S|P_x|v\rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v} = \frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0}$ tanımını yaparsak,

$$(\tilde{W} - W)_{11} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \right) \quad \text{elde ederiz. Yine benzer şekilde}$$

$$(\tilde{W} - W)_{55} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \right) \quad \text{olduğu da aşikârdır. Matrisin 1 ve 5 satırının bu}$$

elemanlar haricindeki bütün terimleri sıfırdır.

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{22} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X + iY) \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow | \tilde{W} - W - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow \right\rangle + \left\langle \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow \right\rangle \\ &= \frac{2}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{6} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \downarrow \rangle \\ &= \frac{2}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle + \frac{1}{6} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\ &= \frac{2}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{6} \{ Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2) + Rk_y^2 + S(k_x^2 + k_z^2) \} \\ &= \frac{2}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{6} \{ Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2) + Rk_y^2 + S(k_x^2 + k_z^2) \} \\ &= \frac{1}{6} (R + 5S)(k_x^2 + k_y^2) + \frac{1}{3} (2R + S)k_z^2 \end{aligned}$$

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,

$$L = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X | P_x | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_v \frac{|\langle X | P_y | v \rangle|^2}{\bar{\epsilon} - \epsilon_v}$$

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

$$(\tilde{W} - W)_{22} = G(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ elde edilir.}$$

$$(\tilde{W} - W)_{33} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow | \tilde{W} - W | \frac{1}{\sqrt{2}} | (X + iY) \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= \frac{1}{2} (R + S)(k_x^2 + k_y^2) + S k_z^2 = F(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

elde edilir.

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

$$= \frac{1}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle$$

$$= \frac{1}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} + \frac{1}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle$$

$$= \frac{1}{3} \{ (R + 2S)(k_x^2 + k_y^2) + 2S k_z^2 + R k_z^2 \} = \frac{1}{2} (F(k) + G(k)) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$(\tilde{W} - W)_{55} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m'_c} - \frac{1}{m_0} \right)$$

$$(\tilde{W} - W)_{66} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{6} \langle (X - iY) \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{2}{3} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{6} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} + \frac{2}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle \\
&= \frac{2}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{6} \{ Rk_x^2 + S(k_y^2 + k_z^2) + Rk_y^2 + S(k_x^2 + k_z^2) \} \\
&= \frac{1}{6} (R + 5S)(k_x^2 + k_y^2) + \frac{1}{3} (2R + S)k_z^2 \\
&= G(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ elde edilir.}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{77} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY) \downarrow | \tilde{W} - W | \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{2} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\
&= \frac{1}{2} (R + S)(k_x^2 + k_y^2) + Sk_z^2 = F(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{88} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} + \frac{1}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle \\
&= \frac{1}{3} \{ (R + 2S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2 + Rk_z^2 \} = \frac{1}{2} (F(k) + G(k)) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
\end{aligned}$$

elde edilmiş olur.

Şimdi de diyagonal olmayan elemanları bulacak olursak,

$$(\tilde{W} - W)_{21} = \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | iS \uparrow \rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{12} \text{ dir.}
\right.$$

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{23} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \uparrow \rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{3}} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \}
\end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{3}} \{Tk_x k_z + iTk_y k_z\} = -\frac{1}{\sqrt{3}} Tk_z (k_x + ik_y) = iH^* \text{ elde edilir.}$$

$$(\tilde{W} - W)_{23} = iH^* \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{32} = -iH \text{ dir.}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{24} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{3}} | (X + iY) \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \uparrow \rangle \right\rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{3\sqrt{2}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X + iY) \downarrow \rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z | \tilde{W} - W | Z \rangle + \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle + i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) + \frac{1}{3\sqrt{2}} ((R + S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \text{ elde edilir.} \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{24} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{42} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \text{ dir.}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{25} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| iS \downarrow \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{52} \\ (\tilde{W} - W)_{26} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= \frac{1}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle - \frac{1}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\ &= \frac{1}{3} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle - \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} = 0 \end{aligned}$$

$$\text{elde edilir. } (\tilde{W} - W)_{26} = 0 \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{62} = 0 \text{ dir.}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{27} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \downarrow \rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (R - S)(k_x^2 - k_y^2) - \frac{1}{\sqrt{3}} Tk_x k_y = I \text{ elde edilir.} \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{27} = I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{62} = I^* \text{ dir.}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{28} &= \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \right\rangle \\ &= \frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\ &= \frac{\sqrt{2}}{3} (\langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle) + \frac{1}{2\sqrt{3}} (\langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle) \\ &= i\sqrt{\frac{3}{2}} H \text{ elde edilir.} \end{aligned}$$

$$(\tilde{W} - W)_{28} = i\sqrt{\frac{3}{2}} H \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{82} = -i\sqrt{\frac{3}{2}} H^* \text{ elde edilir.}$$

$$(\tilde{W} - W)_{31} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| iS \uparrow \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{13}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{34} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \uparrow | \tilde{W} - W | Z \uparrow \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ Tk_x k_z + iTk_y k_z \} = \frac{1}{\sqrt{6}} Tk_z (k_x + ik_y) = \frac{i}{\sqrt{2}} H \end{aligned}$$

elde edilir.

$$(\tilde{W} - W)_{34} = \frac{i}{\sqrt{2}} H \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{43} = -\frac{i}{\sqrt{2}} H^* \text{ dir.}$$

$$(\tilde{W} - W)_{35} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| iS \downarrow \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{53}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{36} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \right\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{12}} \langle (X + iY) \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{12}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{3}}(R-S)(k_x^2 - k_y^2) + \frac{1}{\sqrt{3}}Tk_xk_y = -I$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{36} = -I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{63} = -I^*$ dir.

$$(\tilde{W} - W)_{37} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0 = (\tilde{W} - W)_{73}$$

$$\begin{aligned} (\tilde{W} - W)_{38} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| -\frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow \rangle \right\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) | \tilde{W} - W | (X - iY) \rangle \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle (X + iY) | \tilde{W} - W | (X - iY) \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle (X + iY) | \tilde{W} - W | (X - iY) \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}}(R-S)(k_x^2 - k_y^2) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}Tk_xk_y = -\sqrt{2}I \text{ elde edilir.}$$

$(\tilde{W} - W)_{38} = -\sqrt{2}I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{83} = -\sqrt{2}I^*$ elde edilmiş olur.

$$(\tilde{W} - W)_{46} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle - \frac{1}{3\sqrt{2}} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \}$$

$$= -i\sqrt{\frac{2}{3}}H$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{46} = -i\sqrt{\frac{2}{3}}H \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{64} = i\sqrt{\frac{2}{3}}H^*$ elde edilmiş olur.

$$(\tilde{W} - W)_{47} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \right\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \downarrow \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle - \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \\
&= \frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}} (R - S)(k_x^2 - k_y^2) - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} T k_x k_y = \sqrt{2} I
\end{aligned}$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{47} = \sqrt{2} I \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{74} = \sqrt{2} I^*$ elde edilmiş olur.

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{48} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X + iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{3} \langle (X + iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle - \frac{1}{3} \langle Z \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle \\
&= \frac{1}{3} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle - i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} - \frac{1}{3} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \} = 0
\end{aligned}$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{48} = 0 \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{84} = 0$ elde edilmiş olur.

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{67} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \langle Z | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle Z | \tilde{W} - W | Y \rangle \} \\
&= -iH
\end{aligned}$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{67} = iH \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{76} = iH^*$ elde edilmiş olur.

$$\begin{aligned}
(\tilde{W} - W)_{68} &= \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \uparrow | - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle \\
&= \frac{1}{3\sqrt{2}} \langle (X - iY) \uparrow | \tilde{W} - W | (X - iY) \uparrow \rangle - \frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | X \rangle - i \langle X | \tilde{W} - W | Y \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | X \rangle + \langle Y | \tilde{W} - W | Y \rangle \} - \frac{\sqrt{2}}{3} \langle Z \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= -\frac{\sqrt{2}}{3} (Rk_z^2 + S(k_x^2 + k_y^2)) \frac{1}{3\sqrt{2}} ((R + S)(k_x^2 + k_y^2) + 2Sk_z^2) \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F)
\end{aligned}$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{68} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F) \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{86} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (G - F)$ elde edilmiş olur.

$$(\tilde{W} - W)_{78} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY) \downarrow | \left| \tilde{W} - W \right| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY) \downarrow | \tilde{W} - W | Z \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \langle X | \tilde{W} - W | Z \rangle + i \langle Y | \tilde{W} - W | Z \rangle \} \\
&= -\frac{i}{\sqrt{2}} H^*
\end{aligned}$$

elde edilir. $(\tilde{W} - W)_{78} = -\frac{i}{\sqrt{2}} H^* \Rightarrow (\tilde{W} - W)_{87} = \frac{i}{\sqrt{2}} H$

Bu sonuçları tablo 2. 3 de gösterebiliriz.

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

Şimdi aşağıdaki tanımları yaparak Luttinger-Kohn Hamiltoniyenini oluşturabiliriz.

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

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

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

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

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

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

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

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

Tablo 2. 4 Luttinger-Kohn Hamiltoniyenin matris temsili

2. 2 Seyreltik III-N-V Yarıiletkenler

Arsenik ve fosfat tabanlı III-V yarıiletkenler uzun yıllardır geniş bir şekilde araştırılmışlardır. Bu araştırmaların sonuçları, bugünkü elektronik ve opto-elektronik teknolojide geniş bir şekilde kullanılmaktadır. Bu malzemeler ne yazık ki orta ve dar bant aralıklı uygulamalar ile limitlidir. Yüksek güçlü elektronik ve kısa dalga boylu opto-elektronik gibi geniş bant aralıklı aygıtların fabrikasyonuna uygun değildir. Geniş bant aralıklı malzemelerin gelişmeleri yavaş ve sorunlu olmuştur. Yine de mavi LEDs ve lazerlerin geliştirilmesi gibi nitratları son gelişmeler bu alanları ilgi odağı haline getirmiştir. Orta bant aralıklı arsenik ve geniş bant aralıklı nitratlar arasındaki bant geçiş köprüsünün doğal devamlılığı, ilgili araştırmalarda bir patlamaya neden olmuştur. Bununla beraber, GaAs bileşiğine küçük bir miktar azot eklenmesi sonucu ile bant aralığının büyümesi beklenirken, tam ters bir etkiye, yani bant aralığının hızlı bir şekilde azaldığı sonucu bulunmuştur [11]. Bu nadir davranış hem potansiyel dar aralık uygulamaları hem de fiziksel bakış açısından oldukça ilgi uyandırmıştır. Seyreltik nitratlar olarak bilinen bu yeni hibrit alaşımlar bu aktif çalışmanın konusudur.

Seyreltik nitratlar yüksek güç ve yüksek sıcaklık elektronik aletleri için temel olduğundan; transistörler, güneş pilleri, fotodetektörler ve lazerleri içeren geniş bir uygulama alanına sahiptir. Bu yarıiletkenler geleneksel (Al, Ga)As, (Ga, In)As ve (Ga, As)P gibi III-V alaşımlarından oldukça farklıdır ve çok çarpıcı yeni özellikler gösterir. (Ga, In)As veya GaAs içine çok küçük miktarda azot katıldığında elektronik bant yapısında büyük değişimler olmaktadır. Bu değişimler, enerji bant aralığının küçülmesi, elektronun etkin kütlelerinde önemli bir artış, yeni bantların şekillenmesi, vb. şeklinde sayılabilir.

Seyreltik nitratların elektronik bant yapısı geleneksel III-V yarıiletkenlerden tamamen farklı olduğu için, III-V ve II-VI yarıiletkenleri tasviri için yaygın olarak kullanılan 8 bant $\vec{k} \cdot \vec{p}$ modeli bu yapılar için kullanılamaz. Bu yapıların elektronik bant yapısını tasvir etmek için yeni bir 10 bant $\vec{k} \cdot \vec{p}$ modeli geliştirmemiz gerekir. Bu bölümün amacı bu alaşımların bant yapısını tasvir etmektedir.

(Ga,In)(N,As) bileşiğinin iletim bant yapısını hesaplamak için 4-bant Band Anti-Crossing (BAC) modeli kullanılır. BAC modeli GaInAs'ın temel durumları ve lokalize azot durumları arasındaki çiftlenimi tasvir etmektedir.

(Ga,In)(N,As)'ın valans bant yapısını hesaplamak için de 6-bant Luttinger – Kohn Hamiltonian'ı kullanılır.

2.3 Bant Anti-Crossing (BAC) Yaklaşımı

Hem parabolik hem de $\vec{k} \cdot \vec{p}$ modellerinde, BAC yaklaşımı genellikle iletim bant yapısı üzerine azot (N) etkisini hesaba katmak için kullanılır. GaAs valans bandı ile ilişkili, lokalize azot (E_N) 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 üst üste binmeye başlar. %5 azottan daha az malzemelerde, dalga fonksiyonlarındaki üst üste binme rezonans enerjisinde bir azalmaya neden olur. Bu azalma aşağıdaki denklem ile verilir.

$$E_N = E_N^0 - \gamma y \quad (2.34)$$

burada E_N^0 izole azot kusuru enerjisidir ve genellikle 1.7 eV [23–28] olarak alınır. γ ise 3.89 eV [28] yada 2.52 eV [23] olarak alınır.

Denk(2.34) 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.

$$\begin{vmatrix} E - E_M & V_{MN} \\ V_{MN} & E - E_N \end{vmatrix} = 0 \quad (2.35)$$

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

$$E_{\pm}(k) = \frac{E_N + E_M(k) \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4V_{MN}^2}}{2} \quad (2.36)$$

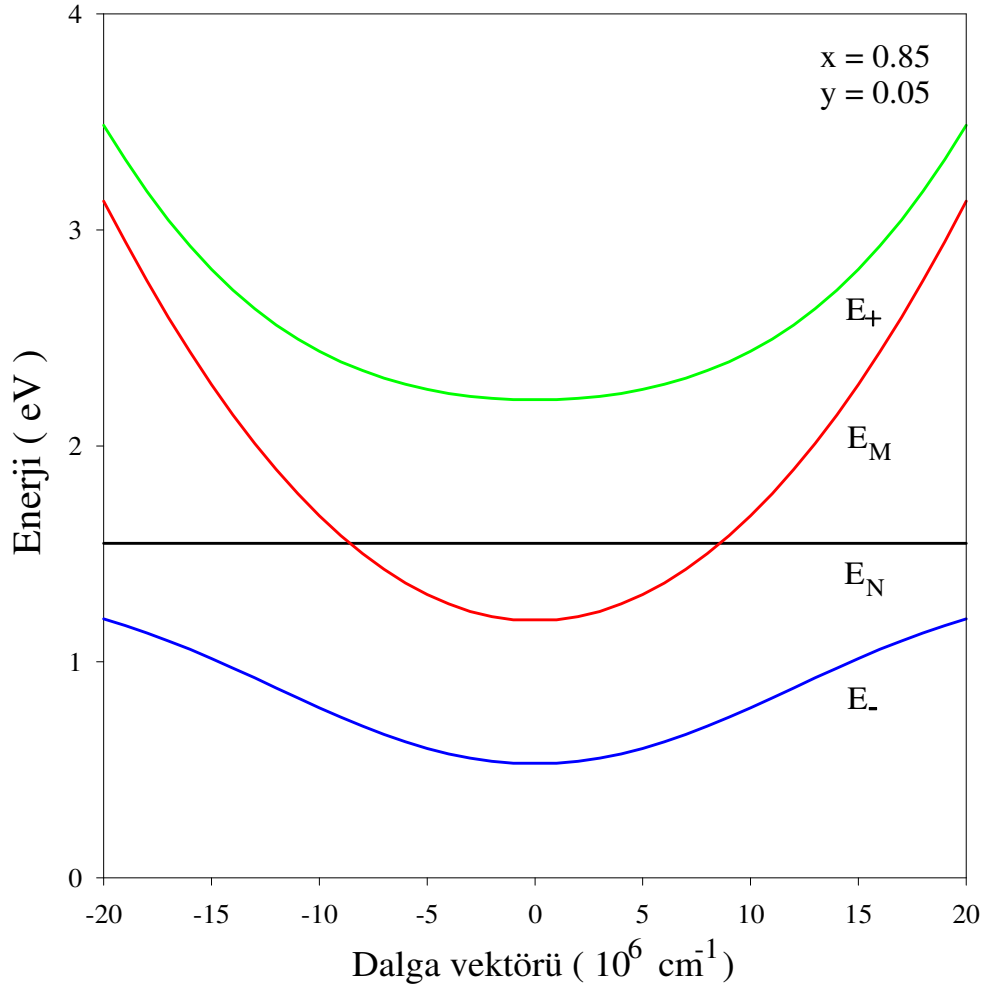
şeklinde elde edilir. V_{MN} matris elemanı aşağıdaki denklemlerle ifade edilir.

$$V_{MN} = \sqrt{\beta}y \quad (2.37)$$

burada $\beta = 1.675 \text{ eV}$ [29] 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

$$E_M(k) = E_M(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.38)$$

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 (2.36) ve denk (2.38) birleştirilmesi ile çözülür. Elde edilen çözüm aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.



Şekil 2. 1. BAC modeli kullanarak 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 (2.36) nın iletim bandının iki ayrık banda yarılmasını gösteren olası iki çözümü vardır (E_+, E_-). E_- E_M seviyesinin altında ve E_+ E_M seviyesinin üstündedir. Mevcut modelde E_- seviyesinin konumu iletim bandının en alt noktası olarak alınır.

2. 4 III-N-V Külçe Yarıiletkenler için 6+4 bant $\vec{k}.\vec{p}$ Teorisi

Bu bölümde III-N-V külçe yarıiletken malzemesinin bant yapısının elde edilmesi için 6+4 bant $\vec{k}.\vec{p}$ 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 [30]. İlk olarak azot katkısının iletim bandı üzerindeki oluşturduğu etkiyi inceleyelim. Hesaplama da kullanılacak yeni baz seti tablo 2. 5 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. 5 Atomik Bloch Seviyeleri

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

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

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

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

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

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

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

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

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

şeklindedir. Bu sonuçlarla, Hamiltoniyenin matris temsili aşağıdaki tanımlar yapılarak,

$$N = E_{N0}$$

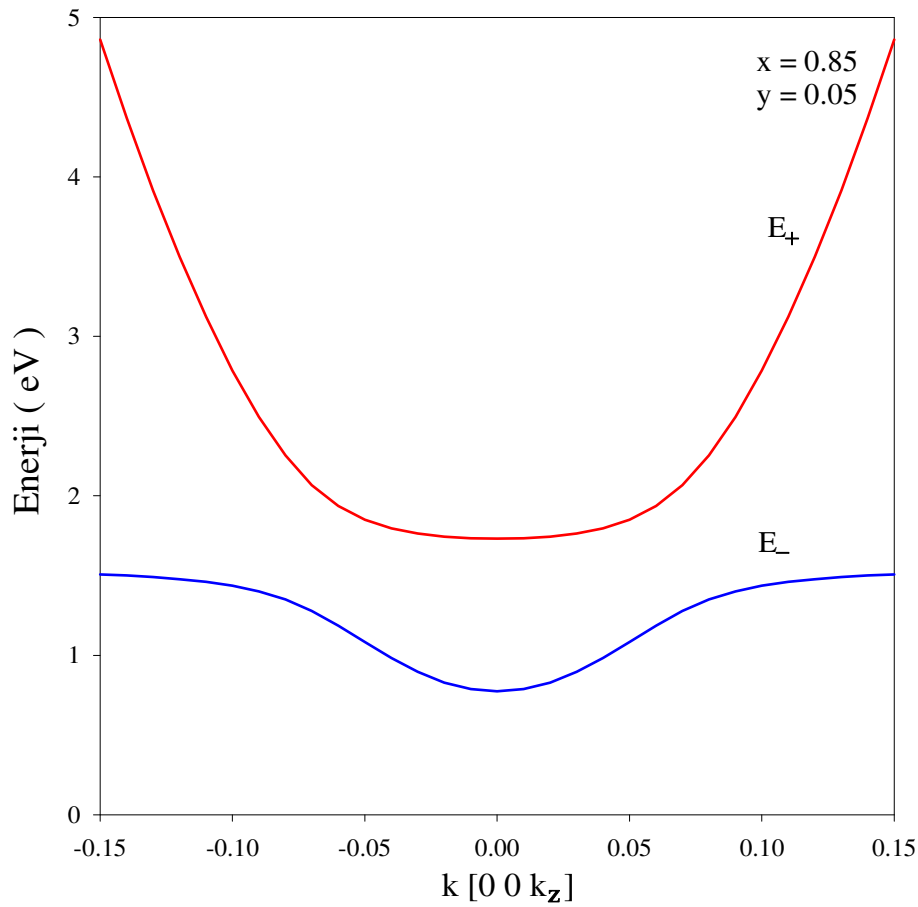
$$E_{N0} = 1.675 - 2.52y$$

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

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

$$H_k + H_s = \begin{bmatrix} N & 0 & V_{NC} & 0 \\ 0 & N & 0 & V_{NC} \\ V_{NC} & 0 & C & 0 \\ 0 & V_{NC} & 0 & C \end{bmatrix}$$

olarak ifade edilir. Burada m^* InGaAs bileşiğinin etkin kütle değeridir. Bu Hamiltoniyen matrisinin çözülmesi ile elde edilen iletim bant yapısı aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.



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

İkinci aşama olarak III-N-V yapısının valans bandını inceleyelim. Hesaplamalarda kullanacağımız baz seti tablo 2. 6 daki orbital bileşenleri ile verilir.

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

Tablo 2. 6 Atomik Bloch Seviyeleri

Bu bazlar kullanılarak oluşan Hamiltoniyenin matris temsili aşağıdaki tanımlar yapılarak,

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

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

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

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

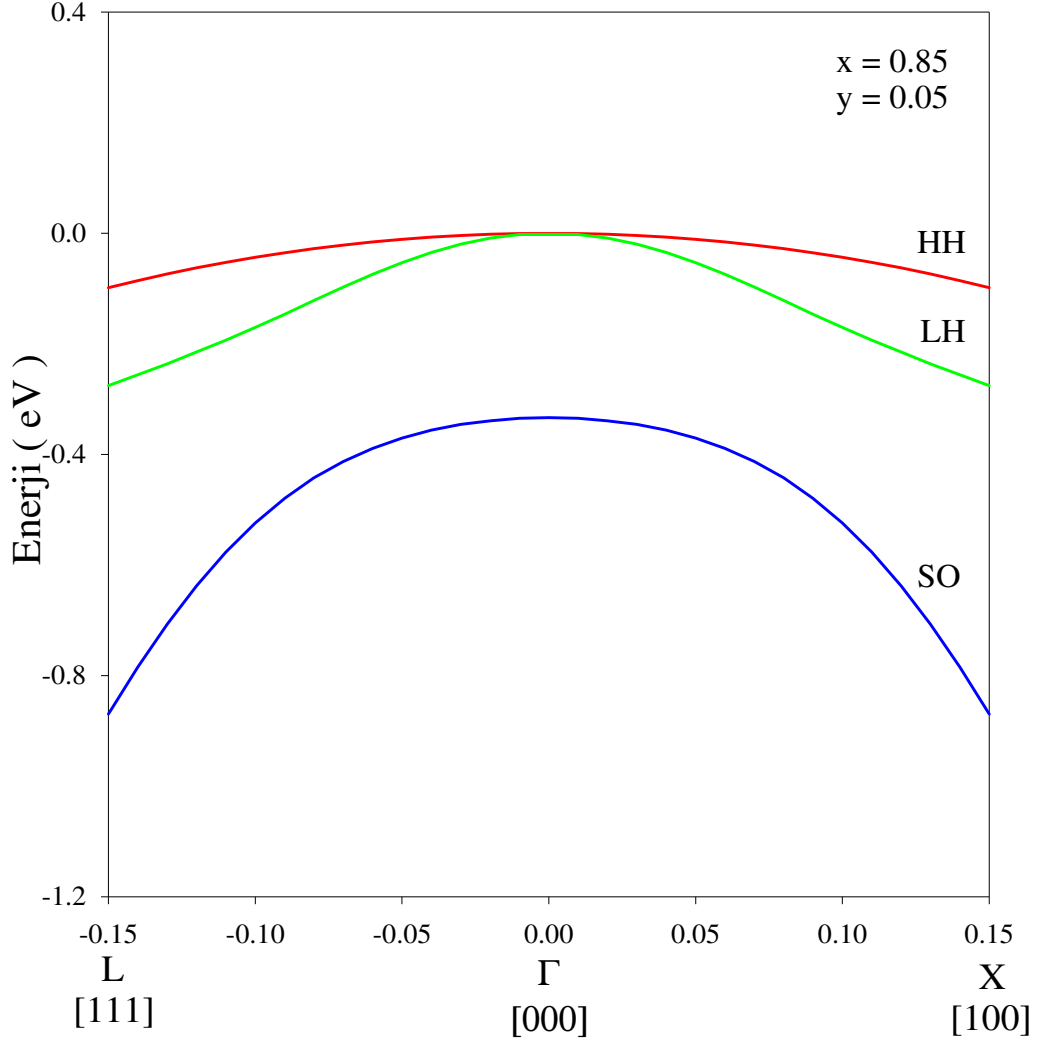
$G - \varepsilon_0$	iH^*	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	0	I	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H$
$-iH$	$F - \varepsilon_0$	$\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$-I$	0	$-\sqrt{2}I$
$-\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F)$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}H$	$\frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta$	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$\sqrt{2}I$	0
0	$-I^*$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$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

şeklinde elde edilir. $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ dörtlü bileşiği için hesaplamalarımızdaki kullandığımız bant parametreleri Ref. 31 dan alınmıştır ve bu parametreler tablo 2. 7'de gösterilmiştir.

Materyal	GaAs	InAs	GaN	InN
$\Delta(eV)$	0.341	0.390	0.017	0.006
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. 7 Bant yapısı hesaplamalarında kullanılan ikili bileşikler için parametreler

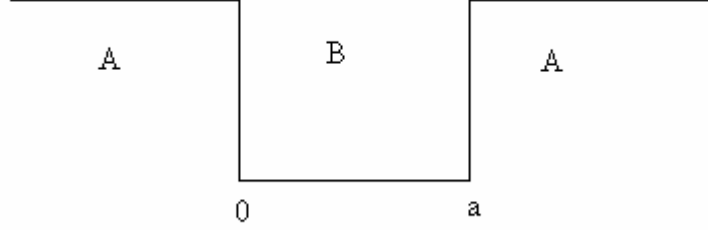
Bu Hamiltoniyen matrisinin çözülmesi ile elde edilen valans bant yapısı aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.



Şekil 2. 3 6-bant modeli kullanılarak elde edilen Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} külçe yapısının valans bantı yapısı

3. Zarf Fonksiyonu Yaklaşımı

A ve B materyalinden oluşan bir 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 Bir kare kuantum kuyusunun şematik gösterimi

A materyalindeki bir parçacığın durumu her zaman,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_m f_m^A(\vec{r}) U_{m\vec{k}_0}^A(\vec{r}) \quad (3.1-a)$$

olarak yazılabilir. Burada direk bant aralıklı materyaller için $\vec{k}_0 = 0$ dır. Eğer buradaki toplam sadece atomik durumların tam seti üzerinden alınır, önceki bölümde tartışılan dalga denkleminin tam bir çözümü elde edilmiş olur. B materyalindeki bir parçacığın durumu da benzer olarak,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_m f_m^B(\vec{r}) U_{m\vec{k}_0}^B(\vec{r}) \quad (3.1-b)$$

şeklinde yazılır. Şimdi toplam dalga fonksiyonunun heteroyapı boyunca yayıldığı kabul edilirse, bu durum açıkça konuma bağlı ağırlık faktörlerinin $f_m^{A,B}$ zarf dalga fonksiyonları olarak isimlendirildiği bazı özel şartların yerine getirilmesiyle gösterilebilir.

Burada toplam dalga fonksiyonlarının atomik kısımlarının özdeş olduğu özel bir yaklaşım ($\vec{k}_0 = 0$) yapılırsa, yani

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

biçiminde seçilir. Burada $U_{m0}^A(\vec{r}), U_{m0}^B(\vec{r})$ dalga fonksiyonları özdeş yapılarına rağmen farklı özdeşlere sahiptir. İlk olarak spine bağlı terimler geçici olarak ihmal edilir.

Böylece sıfırncı derece atomik Hamiltoniyen $H_0 = H(k=0)$ toplam Hamiltoniyenle özdeşdir. 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 denklemi çözülür. Denk (3.1) deki atomik seviyeler ortonormaldir ve kuantum kuyusunun $z=0$ ve $z=a$ ara yüzeylerinden geçen dalga fonksiyonu sürekli ve $f_m^A(\vec{r}_\perp, 0) = f_m^B(\vec{r}_\perp, 0)$, $f_m^A(\vec{r}_\perp, a) = f_m^B(\vec{r}_\perp, a)$ koşulunu sağlarlar.

Burada r_\perp kuantum kuyusu düzlemindeki konum vektörünün bileşenleridir ve a kuantum kuyusunun genişliğidir. Periyodik sınır şartları kuantum kuyu 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 kuantum kuyu düzlemindeki dalga vektörünün bileşenleridir. S kuantum kuyusu düzlemindeki örnek bölgenin alanıdır. Basamak fonksiyonları kullanılarak Hamiltoniyen,

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

biçiminde yazılır. Burada $Y_A(z) = 0$, $Y_B(z) = 1$ $z \in (0, a)$ ve

$Y_A(z) = 1$, $Y_B(z) = 0$ $z \notin (0, a)$ dir. Bu Hamiltoniyeni kullanarak denk (3.3)

$$HU_{l_0}(\vec{r}) = (\epsilon_{l_0}^A Y_A + \epsilon_{l_0}^B Y_B) U_{l_0}(\vec{r}) \quad (3.6)$$

biçiminde yeniden yazılır. Denk(3.4) ve denk(3.1) ifadelerinin birleşimlerinden toplam düzlem Bloch fonksiyonu,

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \sum_l \chi_l^{A,B}(z) U_{l_0}(\vec{r}) \quad (3.7)$$

olarak verilir.

3. 1. İletim Bandı:

İlk aşamada tek çiftlenimsiz iletim bandı göz önüne alınmıştır ve bu durumda denk (3.7) deki toplamda yalnızca $l = c$ terimi olacaktır.

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

biçimindeki dalga denklemi A-engeli için,

$$\left[\frac{P^2}{2m_0} + V_A(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}) \quad (3.9)$$

biçimindedir. $\psi(r)$ için denk(3.7) ifadesi kullanılırsa denk(3.9) aşağıdaki gibi elde edilir,

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

burada kinetik enerji terimi,

$$\frac{P^2}{2m_0} = \frac{P_\perp^2}{2m_0} + \frac{P_z^2}{2m_0} \quad (3.11)$$

biçimindedir. Linear momentumun düzlemdeki ve z-doğrultusundaki bileşenleri sırası ile,

$$\begin{aligned} P_\perp \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \hbar k_\perp \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) P_\perp U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ (P_\perp)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \hbar^2 k_\perp^2 \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \\ &2\hbar k_\perp \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) P_\perp U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) (P_\perp)^2 U_{c_0}(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} P_z \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] P_z \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) P_z U_{c_0}(\vec{r}) \right) \\ (P_z)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] &= \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] (P_z)^2 \chi_c^A(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \\ &2 \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] P_z \chi_c^A(z) P_z U_{c_0}(\vec{r}) \right) + \left(\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^A(z) (P_z)^2 U_{c_0}(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

denklemleri ile elde edilir. B-kuyu materyali için kinetik enerji terimi de bu ifadedeki A indisini yerine B indisini yazmakla elde edilir. Şimdi dalga denklemini soldan

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

ile çarpıp tüm kristal üzerinden integrali alınır. Kristal hacmi üzerinden alınan integraldeki A,B indisleri, kuyu bölgesinde χ_B , engel bölgesinde χ_A , zarf

fonksiyonlarının kullanılacağını gösterir. Öncelikle dalga denkleminin sol tarafını çözmek için kinetik enerjinin düzlemsel bileşeninden işe başlanır,

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c_0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) (P_\perp)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\
& \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c_0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] d^3r + \\
& \frac{2\hbar}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c_0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) \vec{k}_\perp \cdot \vec{P}_\perp U_{c_0}(\vec{r}) \right] d^3r + \\
& \frac{1}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c_0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (P_\perp)^2 U_{c_0}(\vec{r}) \right] d^3r
\end{aligned} \tag{3.14}$$

buradaki integral χ_c zarf fonksiyonunun birim hücre skalası üzerinde yavaş değiştiğini kabul ederek,

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c_0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) U_{c_0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\
& \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \sum_i \chi_c^{*(A,B)}(z_i) \chi_c^{(A,B)}(z_i) \int_{\Omega_i} U_{c_0}^*(\vec{r}) U_{c_0}(\vec{r}) d^3r
\end{aligned} \tag{3.15}$$

ve atomik Bloch durumlarının normalizasyonunu kullanarak,

$$\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \sum_i \chi_c^{*(A,B)}(z_i) \chi_c^{(A,B)}(z_i) \int_{\Omega_i} U_{c_0}^*(\vec{r}) U_{c_0}(\vec{r}) d^3r = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \sum_i \chi_c^{*(A,B)}(z_i) \chi_c^{(A,B)}(z_i) \Omega_i \tag{3.16}$$

biçiminde elde edilir. χ_c zarf fonksiyonunun birim hücre skalası üzerinde yavaş değiştiği gerçeğini tekrar kullanılarak toplam ifadesi,

$$\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) d^3r = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0S} S \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \tag{3.17}$$

biçiminde integrale dönüştürülür. Benzer şekilde düzlemsel kinetik enerjinin diğer terimleri de,

$$\begin{aligned}
& \frac{2\hbar}{2m_0S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c_0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) \vec{k}_\perp \cdot \vec{P}_\perp U_{c_0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\
& \frac{\hbar}{m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \vec{k}_\perp \cdot \int_{\text{hücre}} U_{c_0}^*(\vec{r}) P_\perp U_{c_0}(\vec{r}) d^3r
\end{aligned} \tag{3.18}$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (P_\perp)^2 U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{2m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \int_{\text{hücre}} U_{c0}^*(\vec{r}) (P_\perp)^2 U_{c0}(\vec{r}) d^3 r \end{aligned} \quad (3.19)$$

biçiminde elde edilir. Kinetik enerjinin z bileşeni de aynı yöntem kullanılarak,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) (P_z)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[(P_z^2 \chi_c^{(A,B)}(z)) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{2}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[P_z \chi_c^{(A,B)}(z) P_z U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (P_z)^2 U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) (P_z)^2 \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{2m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) (P_z)^2 \chi_c^{(A,B)}(z) dz + \\ & \frac{1}{m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) P_z \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \int_{\text{hücre}} U_{c0}^*(\vec{r}) P_z U_{c0}(\vec{r}) d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \int_{\text{hücre}} U_{c0}^*(\vec{r}) (P_z)^2 U_{c0}(\vec{r}) d^3 r \end{aligned} \quad (3.21)$$

biçiminde bulunur. Potansiyel enerji terimi ise,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) V_{AB}(\vec{r}) \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \\ & \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[V_{AB}(\vec{r}) \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r \end{aligned} \quad (3.22)$$

biçimindedir. Denk(3.19), denk(3.21) ve denk(3.22) birleştirilirse,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[V_{AB}(\vec{r}) \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (P_\perp)^2 U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r + \\ & \frac{1}{2m_0 S} \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \chi_c^{*(A,B)}(z) \left[\chi_c^{(A,B)}(z) (P_z)^2 U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3 r = \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}^*(\vec{r}) \left[\frac{1}{2m_0} (P_\perp^2 + P_z^2) + V_{A,B}(\vec{r}) \right] U_{c0}(\vec{r}) d^3r = \\ & \frac{1}{S} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}^*(\vec{r}) \left[\varepsilon_{c0}^{(A,B)} \right] U_{c0}(\vec{r}) d^3r = \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{c0}^{(A,B)} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \times \frac{1}{\Omega_0} \int_{\text{hücre}} U_{c0}^*(\vec{r}) U_{c0}(\vec{r}) d^3r = \\ & \varepsilon_{c0}^{(A,B)} \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \end{aligned}$$

eşitliği elde edilir. Sonuç olarak denk(3.10) deki dalga denkleminin sol tarafı,

$$\begin{aligned} & \int_{\text{tümuzay}} U_{c0}^*(\vec{r}) \exp[-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{*(A,B)}(z) \varepsilon \left[\exp[i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp] \chi_c^{(A,B)}(z) U_{c0}(\vec{r}) \right] d^3r = \\ & \varepsilon \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)}(z) \chi_c^{(A,B)}(z) dz \end{aligned} \quad (3.25)$$

biçiminde elde edilir. Kinetik ve potansiyel enerji terimleri birleştirilerek aşağıdaki dönüşüm yardımıyla,

$$\langle l | P | m \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\text{hücre}} U_{l0}^*(\vec{r}) P U_{m0}(\vec{r}) d^3r \quad (3.26)$$

dalga denklemini,

$$\begin{aligned} & \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)} \left[\varepsilon_{c0}^A Y_A + \varepsilon_{c0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle c | P_\perp | c \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle c | P_z | c \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \chi_c^{(A,B)} dz = \\ & \int_{\text{tümuzay}} \chi_c^{*(A,B)} \varepsilon \chi_c^{(A,B)} dz \end{aligned} \quad (3.27)$$

biçiminde elde edilir. Bu ifade aslında çok iyi bilinen standart bir özdeğer denklemi formundadır.

$$\langle \chi | H - \varepsilon | \chi \rangle = 0 \quad (3.28)$$

Burada Hamiltoniyen,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} + \frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle c | P_\perp | c \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle c | P_z | c \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.29)$$

şeklinindedir. Denk (3.29) da $V_c(z) = \varepsilon_{c0}^A Y_A + \varepsilon_{c0}^B Y_B$ dir. Bu mezoskopik potansiyel bant süreksizliğinin sonucudur. Diyagonal dipol matris elemanları sıfırdır ve bu sonuçla denk(3.29),

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} \quad (3.30)$$

biçimine indirgenir.

3. 2 Çiftlenimli Bantlar ve Zarf Dalga Fonksiyonları:

Bu bölümde ayırık zayıf çiftlenimli bantlar ve 8 kuvvetli çiftlenimli bant göz önüne alınır. Önceki bölümde pertürbasyon teorisi ve yapılandırma etkileşimlerini temel olarak oluşturulan külçe III-V yarıiletkenler için işlemleri, konumdan bağımsız c_l (kuvvetli çiftlenimli bantlar) ve c_v (ayırık bantlar) sabitleri yerine zarf fonksiyonlarını kullanarak değiştirilir.

Spin-orbit etkileşimini de içeren periyodik Hamiltoniyen,

$$H_0 = H(k=0) = \frac{P^2}{2m_0} + V_{A,B}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V_{A,B}) \cdot \vec{P} \quad (3.31)$$

biçimindedir. Aşağıdaki dönüşümle spin-yörünge etkileşimi ve periyodik potansiyel gösterimi kısaltılır.

$$V_{A,B}^s(\vec{r}) = V_{A,B}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V_{A,B}) \cdot \vec{P} \quad (3.32)$$

Bu gösterim ile denk(3.3),

$$\begin{aligned} \left[\frac{P^2}{2m_0} + V_A^s(\vec{r}) \right] U_{m_0}^A(\vec{r}) &= \varepsilon_{m_0}^A U_{m_0}^A(\vec{r}) \\ \left[\frac{P^2}{2m_0} + V_B^s(\vec{r}) \right] U_{m_0}^B(\vec{r}) &= \varepsilon_{m_0}^B U_{m_0}^B(\vec{r}) = \varepsilon_{m_0}^B U_{m_0}^A(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.33)$$

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

$$\begin{aligned} \left[\frac{P^2}{2m_0} + V_{A,B}^s(\vec{r}) \right] \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \left(\sum_l \chi_l^{(A,B)}(z) U_{l_0}(\vec{r}) + \sum_v \chi_v^{(A,B)}(z) U_{v_0}(\vec{r}) \right) = \\ \varepsilon \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \left(\sum_l \chi_l^{(A,B)}(z) U_{l_0}(\vec{r}) + \sum_v \chi_v^{(A,B)}(z) U_{v_0}(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Bu ifade de kuvvetli ve ayırık bantlar üzerinden toplamlar ayrabilir. Şimdi külçe yarıiletkenlerde ki çözüme benzer şekilde özdeğer denkleminin çiftlenimli bir seti çözülebilir. Yukarıdaki dalga denklemini soldan,

$$\frac{1}{\sqrt{S}} U_{m_0}^*(\vec{r}) \exp(-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \chi_m^{*(A,B)}(z) \quad (3.35)$$

ile çarpıp kristal hacmi üzerinden integre edilir. Burada m kuvvetli çiftlenimli seviyelerden biridir. Tek bant durumundaki gibi aynı adımlar takip edilirse,

$$\begin{aligned} & \sum_l \left\{ \left[\varepsilon_{m_0}^A Y_A + \varepsilon_{m_0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle m | P_\perp | l \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle m | P_z | l \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_l^{(A,B)} \\ & + \sum_v \left\{ \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle m | P_\perp | v \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle m | P_z | v \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_v^{(A,B)} = 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

biçiminde elde edilir. Benzer şekilde ayrı bantlardan biri olan,

$$\frac{1}{\sqrt{S}} U_{\mu_0}^*(\vec{r}) \exp(-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \chi_\mu^{*(A,B)}(z) \quad (3.37)$$

ile dalga denklemini soldan çarpıp integre edilirse,

$$\begin{aligned} & \sum_v \left\{ \left[\varepsilon_{v_0}^A Y_A + \varepsilon_{v_0}^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \varepsilon \right] \delta_{\mu l} + \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle \mu | P_\perp | v \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle \mu | P_z | v \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_v^{(A,B)} \\ & + \sum_l \left\{ \left[\frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle \mu | P_\perp | l \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle \mu | P_z | l \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \chi_l^{(A,B)} = 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

biçiminde elde edilir. Bu iki ifade,

$$\langle m | W | l \rangle = \frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle m | P_\perp | l \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle m | P_z | l \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad m \neq l \quad (3.39-a)$$

$$\langle m | W | l \rangle = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad m = l \quad (3.39-b)$$

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(3.36) ve denk(3.38) elde edilir. Denk(3.39-a) ve denk(3.39-b) yardımıyla denk(3.36) ve denk(3.38) şu şekilde ifade edilebilir,

$$\sum_l \left\{ \left[\varepsilon_{m_0}^A Y_A + \varepsilon_{m_0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \langle m | \tilde{W} | l \rangle \right\} \chi_l^{(A,B)} + \sum_v \langle m | \tilde{W} | v \rangle \chi_v^{(A,B)} = 0 \quad (3.40-a)$$

$$\sum_v \left\{ \left[\varepsilon_{m_0}^A Y_A + \varepsilon_{m_0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{lv} + \langle \mu | \tilde{W} | v \rangle \right\} \chi_v^{(A,B)} + \sum_l \langle \mu | \tilde{W} | l \rangle \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.40-b)$$

burada zarf fonksiyonları üzerinde bir diferansiyel operatörü de içeren formda W yerine \tilde{W} yazılmıştır. Külçe yarıiletkenler için yapılan aynı tartışmalar takip edilir. l bantları v bantları ile yalnızca zayıf çiflenimli ise,

$$|\chi_l^{(A,B)}(z)\rangle \gg |\chi_v^{(A,B)}(z)\rangle \quad (3.41)$$

Denk(3.40-b) den $(\varepsilon_{\mu 0}^A Y_A + \varepsilon_{\mu 0}^B Y_B - \varepsilon) \gg \langle \mu | \tilde{W} | \nu \rangle$ kabullenimi ile

$$\chi_{\nu}^{(A,B)} \approx + \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{m 0}^A Y_A - \varepsilon_{m 0}^B Y_B} \sum_l \langle \mu | \tilde{W} | l \rangle \chi_l^{(A,B)} \quad (3.42)$$

biçiminde elde edilir. Bu ifade denk(3.40-a) yerine yazılırsa,

$$\sum_l \left\{ \left[\varepsilon_{m 0}^A Y_A + \varepsilon_{m 0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \langle m | \tilde{W} | l \rangle \right\} + \sum_{\nu} \frac{\langle m | \tilde{W} | \nu \rangle \langle \nu | \tilde{W} | l \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{m 0}^A Y_A - \varepsilon_{m 0}^B Y_B} \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.43)$$

biçiminde elde edilir. Bu ifade yeniden düzenlenirse,

$$\sum_l \left\{ \left[\varepsilon_{m 0}^A Y_A + \varepsilon_{m 0}^B Y_B - \varepsilon \right] \delta_{ml} + \langle m | \tilde{W} | l \rangle \right\} + \langle m | \tilde{W} \sum_{\nu} \frac{|\nu\rangle\langle\nu|}{\varepsilon - \varepsilon_{m 0}^A Y_A - \varepsilon_{m 0}^B Y_B} \tilde{W} | l \rangle \chi_l^{(A,B)} = 0 \quad (3.44)$$

eşitliği elde edilir. Külçe yapıdaki tartışmaya benzer olarak,

$$\tilde{\tilde{W}} = \tilde{W} + \tilde{W} \sum_{\nu} \frac{|\nu\rangle\langle\nu|}{\varepsilon - \varepsilon_{\nu 0}^A Y_A - \varepsilon_{\nu 0}^B Y_B} \tilde{W} \quad (3.45)$$

şeklinde tanımlanabilir. Bu tanımlamadan sonra külçe yapı için Luttinger-Kohn formalizasyonunun bütün çözümleri hiçbir değişiklik yapmaksızın tekrarlanabilir.

Bütün matris elemanlarında dalga vektörünün z bileşenini $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$ ile yer değiştirilir.

Çiftlenimli denklemlerin en önemli özelliği Luttinger parametrelerinin ve etkin kütlelerin konumdan bağımsız olmasıdır. Diyagonal olmayan matris elemanları için denk(3.39-a) kullanılır. Burada,

$$\frac{m_0}{M_{ml}^{\alpha,\beta}} = \frac{2}{m_0} \sum_{\nu} \frac{\langle m | P_{\alpha} | \nu \rangle \langle \nu | P_{\beta} | l \rangle}{(\bar{\varepsilon} - \varepsilon_{m 0}^A Y_A - \varepsilon_{m 0}^B Y_B)} \quad (3.46)$$

tanımlanırsa, $\bar{\varepsilon}$ külçe yapıda görülen kuvvetli çiftlenimli bantların ortalama enerjisidir.

Ayrık bantların etkisi,

$$\tilde{\tilde{W}} - \tilde{W} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{M_{ml}^{zz}} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=x,y} k_{\alpha} \frac{1}{M_{ml}^{\alpha z}} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{M_{ml}^{z\alpha}} k_{\alpha} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=x,y} k_{\alpha} \frac{1}{M_{ml}^{\alpha\beta}} k_{\beta} \quad (3.47)$$

biçiminde verilir.

Bu sonuçlarla iletim bandı için elde edilen dalga denklemi,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c^{A,B}} \frac{\partial}{\partial z} + V_c(z) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^{A,B}} \right) \chi_c^{A,B} = \varepsilon \chi_c^{A,B} \quad (3.48)$$

haline gelir. Burada artık elektronun serbest kütlesi yerine yöne bağlı etkin kütlesi kullanılır. Kuantum kuyusu için aşağıda tanımlanan HH ve LH bantlarını tanımlayan 4x4 alt-matris için elde edilen sonuçlar burada verebilir.

H_{hh}	H	I	0
H^*	H_{lh}	0	I
I^*	0	H_{lh}	$-H$
0	I^*	$-H^*$	H_{hh}

Burada,

$$H_{hh} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z}] + V_p(z)$$

$$H_{lh} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z}] + V_p(z)$$

$$H(k) = \frac{\hbar^2}{m_0} \sqrt{3}(k_x - ik_y)(-i) \left(\frac{\partial}{\partial z} \gamma_3 + \gamma_3 \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

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

Zarf fonksiyonları için dalga denkleminin çıkarımında, örgü hücre skalasında bant sınırının yavaş değiştiği kabul edilmedi. Atomik Bloch seviyelerinin kristali geçerken değişmediği kabullenimi açıkça yeterlidir.

3. 3. III-N-V Yarıiletken Kuantum Kuyularının Bant yapısı

Dar bant aralıklı ince bir malzeme (GaInNAs) geniş bant aralıklı (GaAs) iki malzeme arasına yerleştirilmesi ile oluşan yapıya kuantum kuyu yapısı denir. Kuantum kuyuları bir boyutlu kuşatılmış olan yapılardır ve bu yapılar farklı malzemeler ile lazer diyotlar gibi yeni optik aletlerin yapımında kullanılır. III-N-V kuantum kuyularında iletim ve valans bandının enerji bant dağılımı ve dalga fonksiyonlarının hesaplanması genellikle çok karmaşıktır ve analitik çözümleri tam olarak yapılamamaktadır. Burada $\vec{k} \cdot \vec{p}$ metodu üzerine yoğunlaşıldı ve $\vec{k} \cdot \vec{p}$ metodu ile iletim bandı için BAC yaklaşımını, valans bandı için Luttinger-Kohn Hamiltonian'ının birlikte çözümü üzerine çalışıldı.

Büyütme doğrultusu z-ekseni olan bir kuantum kuyusu için çiftlenimli alt-bant enerjileri 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,

$$\left[\bar{\bar{H}} \left(\vec{k}_t, k_z = -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + U_{QW}(z) \bar{\bar{I}} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \bar{g}(z, \vec{k}_t) \quad (3.49)$$

biçiminde verilen etkin kütle eşitliği çözülerek bulunabilir. Burada $U_{QW}(z)$, elektron (holler) için kuantum kuyusu kuşatma potansiyelidir ve

$$\bar{g}(z, \vec{k}_t) = \begin{bmatrix} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_c}(z) \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

N_c tane çiftlenimli bandın zarf fonksiyonudur. Bu çalışmada iletim bandı için BAC yaklaşımı 4×4 , valans bandı için Luttinger-Kohn Hamiltonianı 6×6 büyüklüğünde bir matristir. Bu yüzden de N_c çiftlenimli bant sayısı 4×4 'lük matris durumunda 4,

6×6 'lık matris durumunda ise 6 olarak alındı. Denk(3.49) daki $\bar{\bar{H}} \left(\vec{k}_t, k_z = -i \frac{\partial}{\partial z} \right)$ ifadesi,

$$\bar{\bar{H}}(\vec{k}_t, k_z) = \bar{\bar{H}}_A k_z^2 + \bar{\bar{H}}_B k_z + \bar{\bar{H}}_C \quad (3.41)$$

biçiminde yazılabilir (operatör k_z içinde gizlidir). Hamiltonianın hermitliğini korumak ve heteroyapının ara yüzeydeki akı yoğunluğunun sürekliliğini sağlamak için

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial z^2} H_A(z) &\rightarrow \frac{\partial}{\partial z} H_A(z) \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial z} H_B(z) &\rightarrow \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} H_B(z) + H_B(z) \frac{\partial}{\partial z} \right]\end{aligned}$$

dönüşümü yapılır ve

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_B(z) \right) + \bar{H}_C(z) + U_{QW}(z) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \bar{g}(z, \vec{k}_t) \quad (3.42)$$

elde edilir. Şimdi iletim ve valans çiftlenimli alt bantları için etkin kütle denklemindeki $\bar{H}_A, \bar{H}_B, \bar{H}_C$ matrisleri ve $U_{QW}(z)$ kuşatma potansiyelini açık bir şekilde ifade edelim.

a) İletim bandı: $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ külçe yapısı için 2 bölümde elde edilen 4×4 'lük Hamiltoniyen matrisinden yararlanılarak;

$$\bar{H}(\vec{k}_t, k_z) = \begin{bmatrix} N & 0 & V_{NC} & 0 \\ 0 & N & 0 & V_{NC} \\ V_{NC} & 0 & C & 0 \\ 0 & V_{NC} & 0 & C \end{bmatrix} \quad \bar{g}(z, \vec{k}_t) = \begin{bmatrix} S_N \uparrow \\ S_N \downarrow \\ S \uparrow \\ S \downarrow \end{bmatrix}$$

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

$$U_{QW}(z) = \begin{cases} Q_c \Delta E g & , \quad z < -\frac{Lw}{2} \\ 0 & , \quad -\frac{Lw}{2} \leq z \leq \frac{Lw}{2} \\ Q_c \Delta E g & , \quad z > \frac{Lw}{2} \end{cases}$$

biçiminde verilir. Burada $Q_c = 0.80$ ve $\Delta E g = E_g(\text{GaAs}) - E_g(\text{GaInNAs})$ olarak alınmıştır. N ve V_{NC} 'nin açık ifadeleri **Bölüm 2.3**'de verilmiştir.

b) Valans bandı: $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ külçe yapısı için 2 bölümde elde edilen 6x6'lık Hamiltoniyen matrisinden yararlanılarak;

$$\bar{\bar{H}}(\bar{k}_t, k_z) = \begin{bmatrix} G - \varepsilon_0 & iH^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) & 0 & I & i\sqrt{\frac{3}{2}}H \\ -iH & F - \varepsilon_0 & \frac{i}{\sqrt{2}}H & -I & 0 & -\sqrt{2}I \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) & -\frac{i}{\sqrt{2}}H & \frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta & -i\sqrt{\frac{3}{2}}H & \sqrt{2}I & 0 \\ 0 & -I^* & i\sqrt{\frac{3}{2}}H^* & G - \varepsilon_0 & -iH & -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) \\ I^* & 0 & \sqrt{2}I^* & iH^* & F - \varepsilon_0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}H^* \\ -i\sqrt{\frac{3}{2}}H^* & -\sqrt{2}I^* & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}(G - F) & \frac{i}{\sqrt{2}}H & \frac{1}{2}(F + G) - \varepsilon_0 - \Delta \end{bmatrix}$$

$$\bar{g}(z, \bar{k}_t) = \begin{bmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix}$$

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

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

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

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.

$$U_{QW}(z) = \begin{cases} Q_c \Delta E g & , \quad z < -\frac{Lw}{2} \\ 0 & , \quad -\frac{Lw}{2} \leq z \leq \frac{Lw}{2} \\ Q_c \Delta E g & , \quad z > \frac{Lw}{2} \end{cases}$$

biçiminde verilir. Burada $Q_c = 0.20$ ve $\Delta E g = E_g(GaAs) - E_g(GaInNAs)$ olarak alınmıştır.

Kuantum kuyusunun iletim ve valans bantların yapısını belirlemek için elde edilen çiftlenimli diferansiyel denklem takımları Sonlu Elemanlar Yöntemi (FEM) kullanılarak çözülebilir.

4. Sonlu Elemanlar Yöntemi (FEM)

Sonlu Elemanlar Yöntemi çok çeşitli fiziksel sistemlere ilişkin sayısal hesaplamalarda kullanılan bir yöntemdir [32]. 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, enerjide Rydberg enerjisi ile ölçeklenerek boyutsuz Hamiltonian elde edilebilir.

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

Bu durumda boyutsuz Hamiltonian ile Schrödinger denklemi;

$$H\Psi = \varepsilon\Psi \quad (4.3)$$

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

$$\Psi \rightarrow \psi(\vec{r}) \quad (4.4)$$

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

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad (4.5)$$

biçimindedir. Sayısal hesaplamalar için ilgili çalışma uzayı bölmelendirilmelidir. Bu anlamda bölmelendirilmiş uzaydaki toplam düğüm noktası (nod) sayısı N_{top} , yine ilgili uzayı geren baz fonksiyonları $\varphi_n(r)$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_{top}} \psi_n \varphi_n(\vec{r}) \quad (4.6)$$

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

$$\bar{\varphi}^T(\vec{r}) = \{\varphi_1(\vec{r}), \varphi_2(\vec{r}), \varphi_3(\vec{r}), \dots, \varphi_{N_{top}}(\vec{r})\} \quad (4.7)$$

$$\bar{\psi}^T = \{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_{N_{top}}\}$$

olmak üzere

$$\psi(\vec{r}) = \bar{\varphi}^T(\vec{r}) \cdot \bar{\psi} \quad (4.8)$$

biçimindedir. Böylelikle sistemde bulunması gereken N_{top} adet değişim parametresi $\psi_{N_{top}}$ "Galerkin Yöntemi" ile elde edilebilir [33]. Burada temel ilke, Schrödinger denklemini aranan $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu ile yazmak, denklemi soldan fonksiyonun hermitik eşleniği ile çarpmak ve ilgili uzayda integral olarak sistemin değişim parametrelerinin minimum kılacağı ifadeyi oluşturmaktadır.

Yani, $\psi(\vec{r})^\dagger = \bar{\psi}^\dagger \cdot \bar{\varphi}(\vec{r})$ olmak üzere

$$G = \int_{\Omega} \psi(\vec{r})^\dagger (H - \epsilon I) \psi(\vec{r}) d\Omega \quad (4.9)$$

burada I , $(N_{top}) \times (N_{top})$ boyutlu birim matristir. Ayrıca $\psi(\vec{r})$, sisteme ilişkin tam çözüm ise $G = 0$, değilse $G \neq 0$ olacaktır. G 'yi minimum yapan (ψ, ψ^\dagger) ailesi aynı zamanda enerjiyi de minimum kılacaktır. Aranan dalga fonksiyonu ve hermitik eşleniği yerine yazılırsa,

$$G = \bar{\psi}^\dagger \cdot \left[\int_{\Omega} \bar{\varphi}(\vec{r}) (H - \epsilon I) \bar{\varphi}^T(\vec{r}) d\Omega \right] \cdot \bar{\psi} \quad (4.10)$$

sembolik değişim yazılırsa,

$$\frac{\partial G}{\partial \bar{\psi}^\dagger} = 0 \quad (4.11)$$

$$\left[\int_{\Omega} \bar{\varphi}(\vec{r}) (H - \epsilon I) \bar{\varphi}^T(\vec{r}) d\Omega \right] \cdot \bar{\psi} = 0 \quad (4.12)$$

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

$$-\int_{\Omega} \bar{\varphi}(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \bar{\varphi}^T(\vec{r}) d\Omega = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \bar{\varphi}(\vec{r}) \vec{\nabla} \bar{\varphi}^T(\vec{r}) d\Omega - \int_{\Omega} \vec{\nabla}(\bar{\varphi}(\vec{r}) \vec{\nabla} \bar{\varphi}^T(\vec{r})) d\Omega$$

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

$$-\int_{\Omega} \bar{\varphi}(\bar{r}) \bar{\nabla}^2 \bar{\varphi}^T(\bar{r}) d\Omega = \int_{\Omega} \bar{\nabla} \bar{\varphi}(\bar{r}) \bar{\nabla} \bar{\varphi}^T(\bar{r}) d\Omega - \int_{\Gamma} \bar{\varphi}(\bar{r}) \bar{\nabla} \bar{\varphi}^T(\bar{r}) d\bar{\Gamma}$$

ilgilenilen 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.

$$\bar{\varphi}_{\text{yüzey}} = 0 \quad (4.13)$$

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

$$\left[\int_{\Omega} \left(\nabla \bar{\varphi} \nabla \bar{\varphi}^T + \bar{\varphi} V(\bar{r}) \bar{\varphi}^T \right) d\Omega \right] \bar{\psi} = \varepsilon \left[\int_{\Omega} \bar{\varphi} \bar{\varphi}^T d\Omega \right] \bar{\psi} \quad (4.14)$$

Bu ifade yeni bir gösterim ile,

$$\bar{K} \cdot \bar{\psi} = \varepsilon \bar{M} \cdot \bar{\psi} \quad (4.15)$$

biçiminde yazılabilir. Literatürde,

$$\bar{K} \rightarrow \text{Esneklik matrisi}$$

$$\bar{M} \rightarrow \text{Kütle matrisi}$$

olarak isimlendirilir. Ve

$$\begin{aligned} \bar{K} &= \int_{\Omega} \left(\nabla \bar{\varphi} \nabla \bar{\varphi}^T + \bar{\varphi} V(\bar{r}) \bar{\varphi}^T \right) d\Omega \\ \bar{M} &= \int_{\Omega} \bar{\varphi} \bar{\varphi}^T d\Omega \end{aligned} \quad (4.16)$$

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

$$\int_{\Omega} d\Omega = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} d\Omega \quad (4.17)$$

burada N_e , Global Element sayısıdır. O halde,

$$\bar{k}_e = \int_{\Omega_e} \left(\nabla \bar{N} \nabla \bar{N}^T + \bar{N} V(\bar{r}) \bar{N}^T \right) d\Omega \Rightarrow \bar{K} = \sum_{e=1}^{N_e} \bar{k}_e \quad (4.18)$$

$$\bar{m}_e = \int_{\Omega_e} \bar{N} \bar{N}^T d\Omega \Rightarrow \bar{M} = \sum_{e=1}^{N_e} \bar{m}_e \quad (4.19)$$

burada, \bar{N} global eleman baz fonksiyonu, $\bar{\varphi}$ 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 Fonksiyonlarının Seçimi

Fiziksel sistemlerin çözümüne ilişkin güçlü bir yöntem olan FEM’de yaklaşık çözüm sonlu boyuttaki fonksiyon uzayında aranır ve bu uzay bir baz fonksiyonu seti ile tanımlanabilir [34]. N uzay boyutu olmak üzere,

$$\{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_N\} \quad (4.20)$$

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

$$U(z) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(z) \quad (4.21)$$

dir. Burada, c_j skaler bir sabittir. Sıklıkla çözüm uzayını geren baz fonksiyonları polinomların kolay tanımlanması ve iyi bilinen özelliklere sahip olması nedeni ile 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 için tek bir temel set olmadığı için baz fonksiyonlarının seçimi esnekliklidir. Biz polinom uzayı baz fonksiyonları için “*Lagrange Polinomları*” nı seçtik (**Ek-2**). Lagrange polinomları çalışma uzayı Ω içindeki N tane düğüm noktasına (nod) göre $\{z_1, z_2, \dots, z_N\}$ tanımlanır. j nod indisini göstermek üzere $(N - 1)$. derece polinom her z_j ile ilişkilidir. Polinomlar şu özelliğe sahiptir.

$$\phi_i(z_j) = \delta_{ij} \quad (4.22)$$

Bir boyuttaki baz fonksiyonlarını yazmak için çalışma uzayı $[0,1]$ aralığına 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 olacaktır. Baz fonksiyonları

z uzayında ve $\hat{\Omega} = [-1,1]$ aralığında aranır.

4. 2. FEM'in Çiftlenimli Bantlara Uygulanması

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.

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

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

$$+ \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz$$

$$-\bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) \Big|_{z_a}^{z_b} = 0 \quad (4.24)$$

$[g_1^* \ g_2^* \ \dots \ g_{N_C}^*]$ $N_C \times N_C$ matris $N_C \times 1$ matris arayüzey terimi

Not: Hesaplamalarımızda iletim bandı için $N_C = 4$, valans bandı için $N_C = 6$ olarak alındı.

Başlangıçta arayüzey teriminin sıfıra eşit olduğu kabul edilir. Dolayısıyla

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

$$+ \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz = 0 \quad (4.25)$$

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

$$\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} dz \quad (4.26)$$

olur. Bu bilgilerin ışığında,

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \bar{H}_C(z) + (U_{QW}(z) - E(\vec{k}_t)) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz \\
&+ \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \vec{k}_t) \left[\bar{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \bar{H}_B(z) \right] \bar{g}(z, \vec{k}_t) dz = 0
\end{aligned} \tag{4.27}$$

yazılabilir. Global element için aşağıdaki dönüşüm yapılırsa,

$$\begin{array}{ccc}
\begin{array}{c} \xrightarrow{\hspace{1.5cm}} \\ z_j \quad * \hspace{1.5cm} * \quad z_{j+1} \end{array} & \longrightarrow & \begin{array}{c} \xrightarrow{\hspace{1.5cm}} \\ 0 \hspace{1.5cm} 1 \end{array} \\
s = az + b \quad \text{ise} & & a = \frac{1}{z_{j+1} - z_j} \\
1 = az_{j+1} + b & & \\
0 = az_j + b & & b = \frac{z_j}{z_{j+1} - z_j}
\end{array}$$

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,

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

$\bar{g}(z)_{N_C \times 1} \rightarrow \bar{g}(s)_{N_C \times 1}$ (j. global element zarf fonksiyonu)

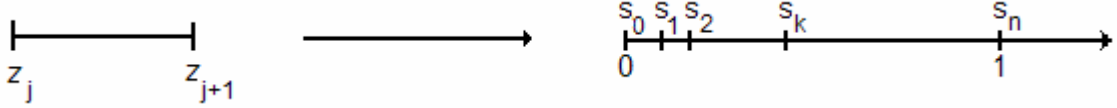
olur. Buradan

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \bar{g}^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} \bar{H}_B \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \bar{H}_C + (U_{QW} - E) \bar{I} \right] \bar{g}(s) ds \\
&+ \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} \bar{g}^\dagger(s) \left[\bar{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \bar{H}_B \right] \bar{g}(s) ds = 0
\end{aligned} \tag{4.28}$$

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

$$+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \bar{g}^\dagger(s) \left[\bar{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \bar{H}_B \right] \bar{g}(s) ds = 0 \quad (4.29)$$

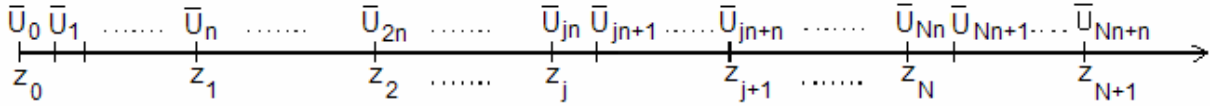
denklemleri elde edilir. Yukarıdaki s dönüşümüyle geçilen $[0, 1]$ uzayında FEM bazları (ϕ 'lerin kümesi) oluşturulabilir. Bu uzayın (global elementin) n parçaya bölünmesi ile uzayda n . dereceden polinomla verilebilen $(n+1)$ tane baz fonksiyonu oluşturulabilir.



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

$$\phi_i(s) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{(s - s_k)}{(s_i - s_k)} \quad (4.30)$$

ile tanımlıdır. Şekil 4. 1. den de görüldüğü gibi, 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. 1. Çiftlenimli bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması

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

$$\bar{U}_{jn+k} = \begin{bmatrix} U_{jn+k,1} \\ U_{jn+k,2} \\ \vdots \\ U_{jn+k,l} \\ \vdots \\ U_{jn+k,N_C} \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

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 yazılırsa,

$$\bar{g}_j(s) = \bar{\phi}(s)^T \bar{U}_{jn+k} \quad (4.32)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}(s) \\ g_{j,2}(s) \\ \vdots \\ g_{j,l}(s) \\ \vdots \\ g_{j,N_c}(s) \end{bmatrix}_{N_c \times 1} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_c \times N_c, n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix}_{N_c, n \times 1} \quad (4.33)$$

N_c tane sütun

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}(s) \\ g_{j,2}(s) \\ \vdots \\ g_{j,l}(s) \\ \vdots \\ g_{j,N_c}(s) \end{bmatrix}_{N_c \times 1} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_c \times N_c, n} \begin{bmatrix} U_{jn+1,1} \\ U_{jn+1,2} \\ \vdots \\ U_{jn+1,N_c} \\ U_{jn+2,1} \\ U_{jn+2,2} \\ \vdots \\ U_{jn+2,N_c} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{jn+n,1} \\ U_{jn+n,2} \\ \vdots \\ U_{jn+n,N_c} \end{bmatrix}_{N_c, n \times 1} \quad (4.34)$$

N_c 'ye N_c 'inci eleman

Burada n, global elementteki nod sayısını ve N_c ise çiftlenimli bant sayısını ifade eder.

$$\bar{g}_j^\dagger(s) = \bar{U}_{jn+k}^\dagger \bar{\phi}(s) \quad (4.35)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}^*(s) & g_{j,2}^*(s) & \cdots & g_{j,l}^*(s) & \cdots & g_{j,N_C}^*(s) \end{bmatrix}_{1 \times N_C} = \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1}^\dagger & \bar{U}_{jn+2}^\dagger & \cdots & \cdots & \bar{U}_{jn+n}^\dagger \end{bmatrix}_{1 \times N_C \cdot n}$$

$$\begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times N_C}$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}^*(s) & g_{j,2}^*(s) & \cdots & g_{j,l}^*(s) & \cdots & g_{j,N_C}^*(s) \end{bmatrix}_{1 \times N_C} =$$

$$\begin{bmatrix} U_{jn+1,1}^\dagger & U_{jn+1,2}^\dagger & \cdots & U_{jn+1,N_C}^\dagger & U_{jn+2,1}^\dagger & \cdots & U_{jn+2,N_C}^\dagger & \cdots & \cdots & U_{jn+n,1}^\dagger & \cdots & U_{jn+n,N_C}^\dagger \end{bmatrix}_{1 \times N_C \cdot n}$$

$$\begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times N_C}$$

şeklinde yazılabilir. Bu bilgiler kullanılarak üretici denklem

$$G = \sum_{j=0}^N \sum_{l=1}^l \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1}^\dagger & \bar{U}_{jn+2}^\dagger & \cdots & \cdots & \bar{U}_{jn+n}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \phi_2(s) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \phi_n(s) \end{bmatrix} \stackrel{.AA.}{=} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \phi_n(s) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \phi_n(s) & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \cdots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & \phi_2(s) & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{j=0}^N \frac{1}{\partial s} \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] \begin{pmatrix} \begin{matrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \phi_n(s) & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \phi_n(s) & 0 \end{matrix} \end{pmatrix} \\
& =_{BB} \begin{pmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{pmatrix} ds = 0
\end{aligned}
\tag{4.36}$$

biçiminde elde edilir. Burada

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

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

dir. Dolayısıyla,

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

$$\sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \dots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] \int_0^1 \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{\overline{BB}} \phi_1(s) & \dots & \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{\overline{BB}} \phi_n(s) \\ \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} \overline{\overline{BB}} \phi_1(s) & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{\overline{BB}} \phi_1(s) & \dots & \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{\overline{BB}} \phi_n(s) \end{pmatrix} ds \begin{pmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{pmatrix} = 0
\tag{4.37}$$

$$G = \sum_{j=0}^N \begin{bmatrix} \bar{U}_{jt+1}^\dagger & \bar{U}_{jt+2}^\dagger & \cdots & \cdots & \bar{U}_{jt+n}^\dagger \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi_1(s) \bar{AA} \phi_1(s) ds & \cdots & \int_0^1 \phi_1(s) \bar{AA} \phi_n(s) ds \\ \int_0^1 \phi_2(s) \bar{AA} \phi_1(s) ds & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \int_0^1 \phi_n(s) \bar{AA} \phi_1(s) ds & \cdots & \int_0^1 \phi_n(s) \bar{AA} \phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\bar{O} \text{ dersek}} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jt+1} \\ \bar{U}_{jt+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jt+n} \end{bmatrix}$$

$$\sum_{j=0}^N \begin{bmatrix} \bar{U}_{jt+1}^\dagger & \bar{U}_{jt+2}^\dagger & \cdots & \cdots & \bar{U}_{jt+n}^\dagger \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \bar{BB} \phi_1(s) ds & \cdots & \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \bar{BB} \phi_n(s) ds \\ \int_0^1 \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} \bar{BB} \phi_1(s) ds & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \int_0^1 \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \bar{BB} \phi_1(s) ds & \cdots & \int_0^1 \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \bar{BB} \phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\bar{P} \text{ dersek}} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jt+1} \\ \bar{U}_{jt+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jt+n} \end{bmatrix} = 0$$

\bar{O} matrisinin kk'inci elemanı

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

(4.38)

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

$$\begin{aligned}
(\overline{\overline{P}})_{kk} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \left[\overline{\overline{H}}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \overline{\overline{H}}_B \right] \phi_k(s) ds \\
&= \frac{\overline{\overline{H}}_A}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{i}{2} \overline{\overline{H}}_B \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds
\end{aligned} \tag{4.39}$$

yazılabilir. Dolayısıyla,

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

yazılabilir. Bu son eşitlik kullanılırsa,

$$G = \sum_{j=0}^N \left[\overline{\overline{U}}_{jn+1}^\dagger \quad \overline{\overline{U}}_{jn+2}^\dagger \quad \cdots \quad \overline{\overline{U}}_{jn+n}^\dagger \right]_{1 \times N_{C.n}} \left(\overline{\overline{O}} + \overline{\overline{P}} \right)_{N_{C.n} \times N_{C.n}} \begin{bmatrix} \overline{\overline{U}}_{jn+1}^\dagger \\ \overline{\overline{U}}_{jn+2}^\dagger \\ \vdots \\ \overline{\overline{U}}_{jn+n}^\dagger \end{bmatrix}_{N_{C.n} \times 1} = 0 \tag{4.41}$$

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

$$\left(\overline{\overline{K}}_1 \right)_{kk} = \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \quad ; \quad \left(\overline{\overline{K}}_2 \right)_{kk} = \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \quad ;$$

$$\left(\overline{\overline{M}}_1 \right)_{kk} = \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds$$

$$\overline{\overline{O}} + \overline{\overline{P}} = \underbrace{\frac{\overline{\overline{H}}_A^j}{L_j} \overline{\overline{K}}_1 + \frac{i}{2} \overline{\overline{H}}_B^j \overline{\overline{K}}_2 + L_j \left(\overline{\overline{H}}_C^j + U_{QW}^j \overline{\overline{I}} \right) \overline{\overline{M}}_1}_{\overline{\overline{K}}} - \underbrace{EL_j \overline{\overline{M}}_1}_{\overline{\overline{M}}}$$

$$\overline{\overline{O}} + \overline{\overline{P}} = \overline{\overline{K}} - E \overline{\overline{M}} \tag{4.42}$$

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

$$\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k,\ell}^*} = 0 \left(\begin{array}{l} jn+k = 1, 2, \dots, n, n+1, n+2, \dots, 2n, 2n+1, \dots, jn, jn+1, jn+k, \dots, Nn+n-1 \\ \ell = 1, 2, \dots, N_C \quad ; \quad k = 1, 2, \dots, N_C \end{array} \right) \quad (4.43)$$

denklemini kullanılır. Dolayısıyla

$$G = \sum_{j=0}^N \left[\begin{array}{cccc} \bar{U}_{jn+1}^\dagger & \bar{U}_{jn+2}^\dagger & \dots & \bar{U}_{jn+n}^\dagger \end{array} \right]_{1 \times N_C \cdot n} \left(\bar{K} - E\bar{M} \right)_{N_C \cdot n \times N_C \cdot n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1}^\dagger \\ \bar{U}_{jn+2}^\dagger \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n}^\dagger \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times 1} = 0 \quad (4.44)$$

ve

$$\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k,\ell}^*} = \left[\begin{array}{c} \boxed{\bar{K} - E\bar{M}} \\ \quad \quad \quad \boxed{N_C \cdot n \times N_C \cdot n} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \boxed{\bar{K} - E\bar{M}} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \boxed{N_C \cdot n \times N_C \cdot n} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \boxed{\bar{K} - E\bar{M}} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \boxed{N_C \cdot n \times N_C \cdot n} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \boxed{\bar{K} - E\bar{M}} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \boxed{N_C \cdot n \times N_C \cdot n} \end{array} \right] \begin{bmatrix} U_{1,1} \\ U_{1,2} \\ \vdots \\ U_{1,N_C} \\ U_{2,1} \\ U_{2,2} \\ \vdots \\ U_{2,N_C} \\ \vdots \\ U_{n,1} \\ U_{n,2} \\ \vdots \end{bmatrix} = 0 \quad (Nn+n-1) \cdot N_C \times (Nn+n-1) \cdot N_C \quad (Nn+n-1) \cdot N_C \times 1$$

denkleminde yararlanarak $(Nn+n-1) \cdot Nc$ tane FEM eşitliği bulunur. Sonuçta FEM denklemlerinin yapısı aşağıdaki gibi olacaktır ve bu matris eşitliğinin çözülmesiyle sistemimizin özdeğer ve özfonksiyonları bulunur.

$$\begin{bmatrix} \overline{\overline{K}} & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & & \overline{\overline{K}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \\ \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \overline{\overline{M}} & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & & \overline{\overline{M}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \\ \end{bmatrix}$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\overline{\overline{KK}}} \quad \underbrace{\hspace{5em}}_{\overline{\overline{U}}} \quad = \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\overline{\overline{MM}}} \quad \underbrace{\hspace{5em}}_{\overline{\overline{U}}}$

$(Nn+n-1)Nc \times (Nn+n-1)Nc \text{ lik} \quad (Nn+n-1)Nc \times 1 \text{ lik} \quad (Nn+n-1)Nc \times (Nn+n-1)Nc \text{ lik} \quad (Nn+n-1)Nc \times 1 \text{ lik}$

matris matris matris matris

(4.45)

$$\overline{\overline{KK}} \overline{\overline{U}} = \overline{\overline{EMM}} \overline{\overline{U}} \tag{4.46}$$

Burada $\overline{\overline{KK}}$, $\overline{\overline{K}}$ matrislerinin iç içe geçmesinden (kronlanması) oluşan matristir. $\overline{\overline{MM}}$ ise $\overline{\overline{M}}$ matrislerinin iç içe geçmesinden oluşan matristir.

5. $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y} / \text{GaAs}$ Tek Kuantum Kuyusunun İletkenlik ve Valans Bandı Yapısı

z doğrultusunda bir yarıiletken kuantum kuyusu için iletim ve 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,

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

şeklinde verilen etkin kütle eşitliği çözülerek bulunabilir. Burada, $V_{C(v)}(z)$

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

ile verilir. İletim bandı için $Q_c = 0.80$, valans bandı için $Q_v = 0.20$ olarak alınmıştır [80]. $\bar{g}(z, \vec{k}_t)$ N_C tane çiftlenimli bandın zarf fonksiyonudur. (Burada iletim bandı için $N_C = 4$ ve valans bandı için $N_C = 6$ olarak alınmıştır).

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

denklem (5.1) çiftlenimli diferansiyel denklemleri içerdiğinden Sonlu Elemanlar Yöntemi (Finite Element Method) kullanılarak çözülebilir. Yukarıdaki özdeğer denklemi **Bölüm 3.4**'te açık hali verilen Hamiltonian ve **Bölüm 4.2**'de anlatılan yol izlenerek

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

şeklinde üretici denklem elde edilir. Literatürde \bar{K} 'ya esneklik (stiffnes) matris, \bar{M} 'ye ise kütle (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 çözülür. Bu bir özdeğer denklemidir ve buradaki özdeğer ve özfonksiyonlar bilinmemektedir. Genelde \overline{K} ve \overline{M} sparse bantlı Hermitien matrislerdir.

İnceleyeceğimiz yapıdaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ yarıiletkeni için materyal parametre değerleri,

$$P(Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}) = xyP(GaN) + x(1-y)P(GaAs) + y(1-x)P(InN) + (1-x)(1-y)P(InAs) \quad (5.6)$$

biçimindeki ikili yarıiletken parametreleri arasındaki lineer ilişki kullanılarak elde edilmiştir. 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_0 (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 [35–45]

Külçe $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ 'ın bant aralığı enerjisinin stres (baskı) içeren katkılılamaya bağlı ifadesi,

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

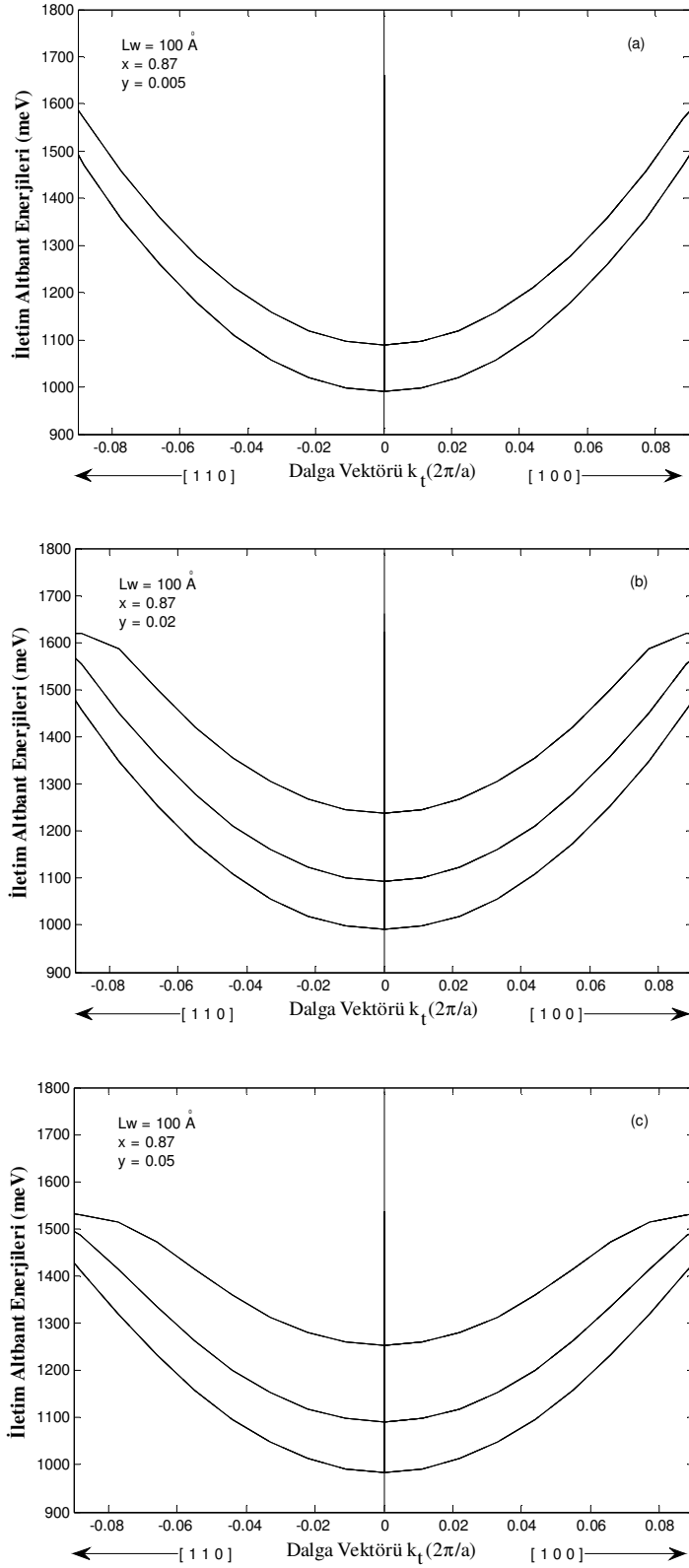
ile verilir [46]. Burada $C_{A-B}(ABC)$ ABC malzemesinin bükülme (bowing) parametreleridir. Bütün ilişkili bükülme parametreleri tablo 5.2 de listelenmiştir.

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

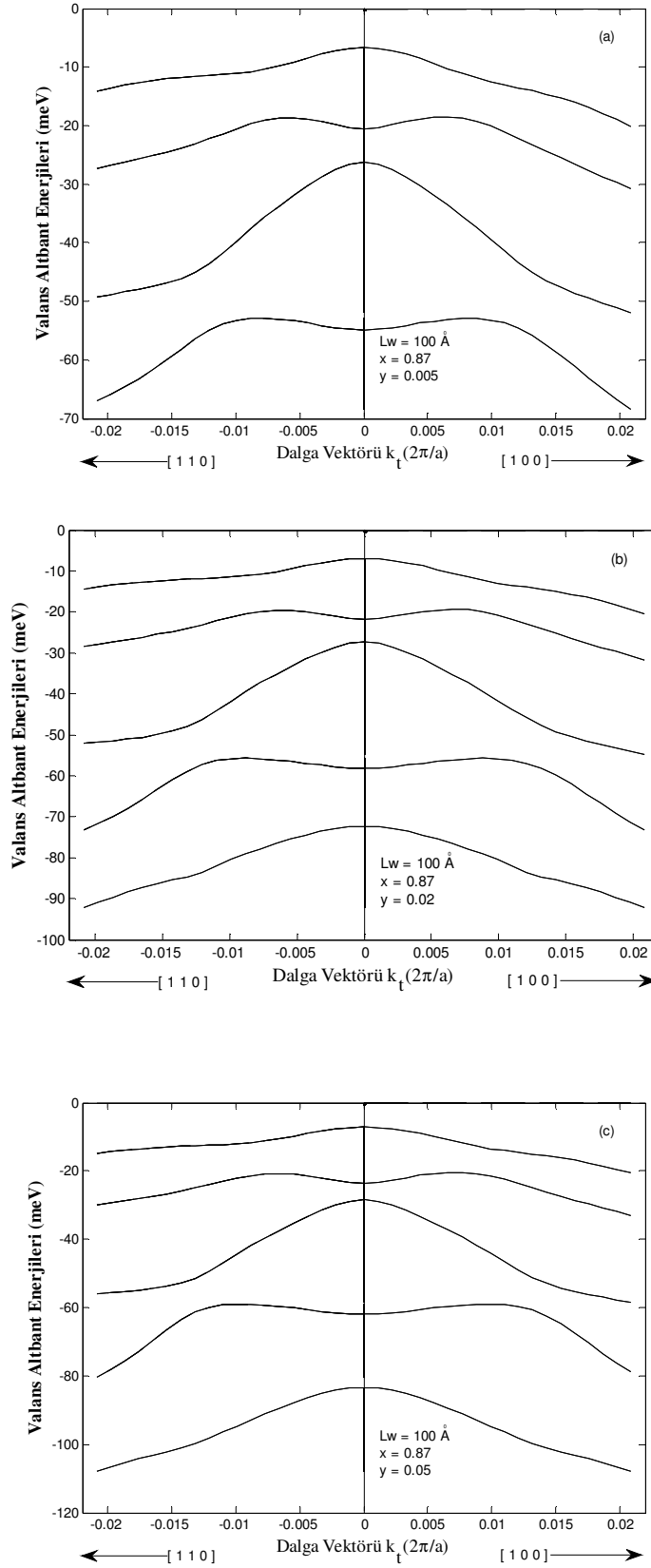
Tablo 5.2 Hesaplamalarda kullanılan bükülme (Bowling) parametreleri (eV) [46–49]

Yukarıdaki formülasyon $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim ve valans bant yapısına uygulanıp elde edilen analitik denklemler bilgisayar programları yardımıyla çözülmüştür. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun azot ve indiyum konsantrasyonları değiştirilerek iletim ve valans bantlarının alt-bant enerjileri incelenmiştir. Sonra yapının kuyu genişlikleri değiştirilerek alt-bant enerjileri incelenerek aşağıdaki sonuçlar elde edilmiştir.

Şekil 5.1 ve 5.2 (a), (b) ve (c)'de $L = 100 \text{ \AA}$ ve $x = 0.87$ durumunda $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim ve valans 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. Şekillerden de görüldüğü gibi yapıdaki azot konsantrasyonu artırıldığı zaman $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ malzemesinin yasak bant aralığının hızla azaldığı ve buna bağlı olarak ΔEg 'in hızlı bir şekilde arttığı görülmüştür. Bu sonuçla azot konsantrasyonunun artırılması ile iletim ve valans bandındaki bant kaymasının büyümesi kuşatma potansiyelinin derinleşmesine sebep olmuştur. Kuantum kuyularındaki potansiyel engeli yani kuşatma potansiyeli yük taşıyıcılarının $\pm\infty$ 'a kaçmasını önler ve lokalizasyonu koruyarak büyük enerji kaymalarının oluşmasını sağlar. Bu durum ekzitonik bağlanmanın verimliliğini ve önemini artıran bir faktör olarak değerlendirilir. Bu etki temel alınarak hızlı modülatörler ve benzeri birçok elektro-optik cihaz geliştirilmiştir. Sonuç olarak $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusu sisteminde alt-bant enerjileri için azot konsantrasyonu bir ayar parametresidir.

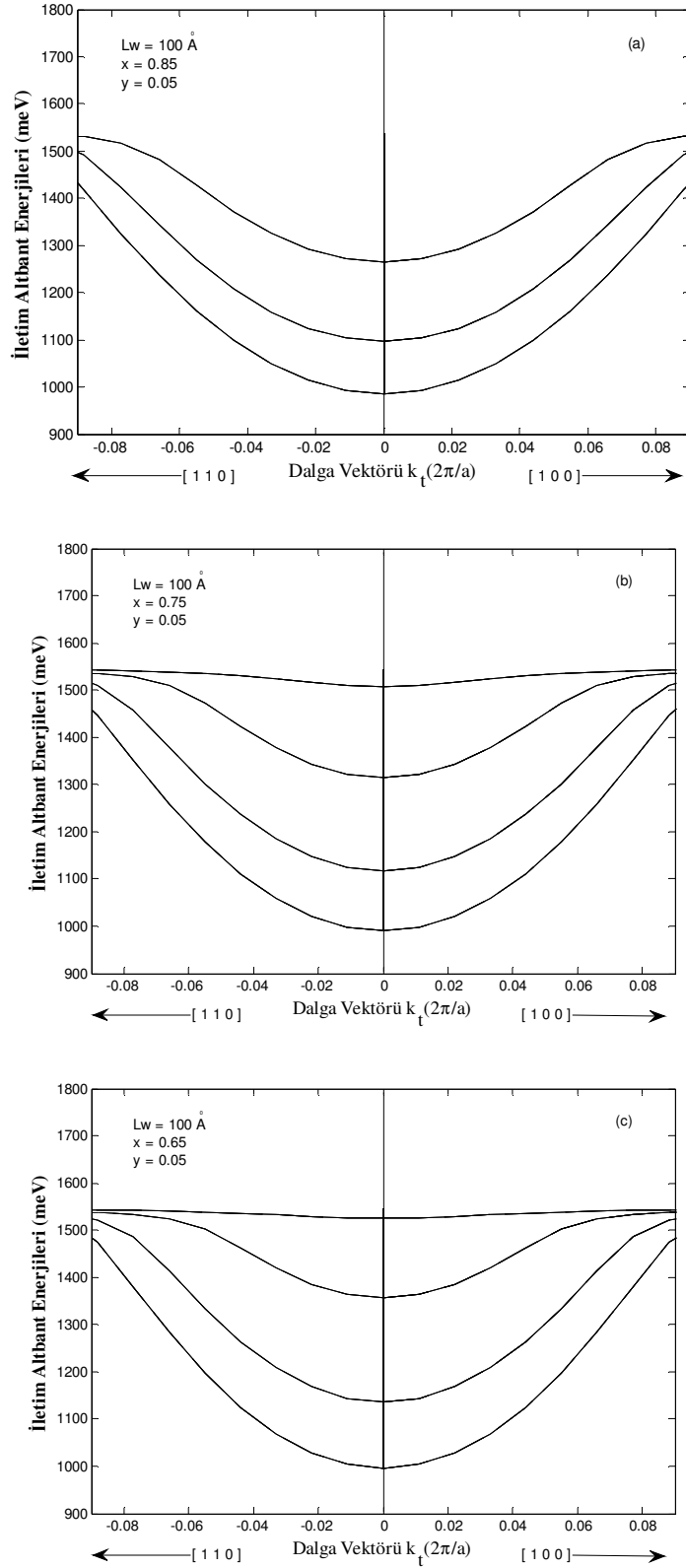


Şekil 5.1. Farklı azot konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.

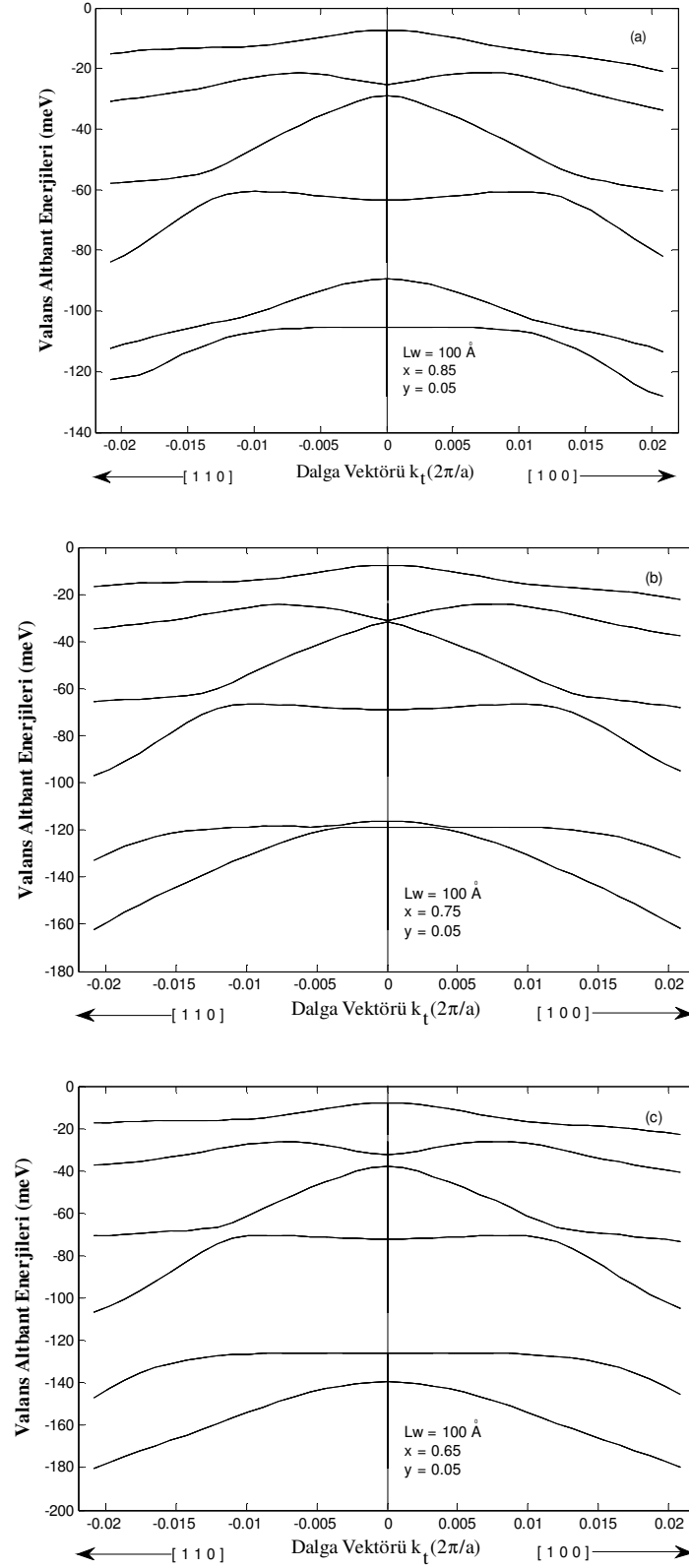


Şekil 5.2. Farklı azot konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.

Şekil 5.3. ve 5.4 (a), (b) ve (c)'de $L = 100 \text{ \AA}$ ve $y = 0.05$ durumunda $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ kuantum kuyusunun iletim ve 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. Şekillerden de görüldüğü gibi yapıdaki indiyum konsantrasyonu artırıldığı zaman $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ malzemesinin yasak bant aralığının hızla azaldığı ve buna bağlı olarak ΔEg 'in hızlı bir şekilde arttığı görülmüştür. Bu sonuçla indiyum konsantrasyonunun artırılması ile iletim ve valans bandındaki bant süreksizliğinin büyümesine ve kuşatma potansiyelinin derinleşmesine sebep olmuştur. Oluşan bu kuşatma potansiyellerindeki derinleşme azot konsantrasyonunun sebep olduğu kuşatma potansiyeli derinleşmesinden daha fazladır. Bu kuşatma potansiyelindeki derinleşme nedeni ile iletim ve valans bant yapısında daha fazla alt bant enerji seviyelerinin oluşmasına neden olmuştur. Aynı zamanda indiyum konsantrasyonunun artırılması kuyu bölgesindeki elektron etkin kütlelerinin azalmasına sebep olur. Bu durum ekzitonik bağlanmanın verimliliğini ve önemini artıran bir faktör olarak değerlendirilir. Sonuç olarak $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusu sisteminde alt-bant enerjileri için indiyum konsantrasyonu da aynı azot konsantrasyonu gibi bir ayar parametresidir.



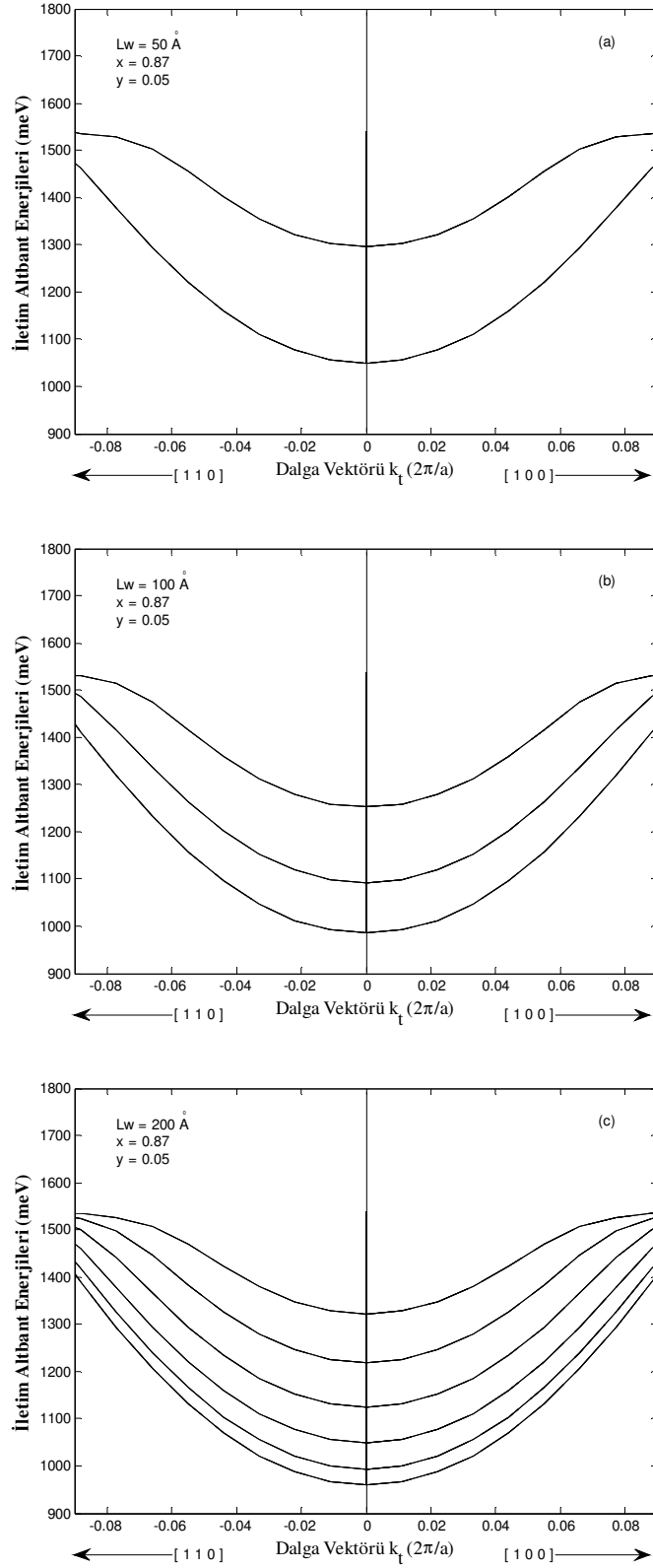
Şekil 5.3. Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.



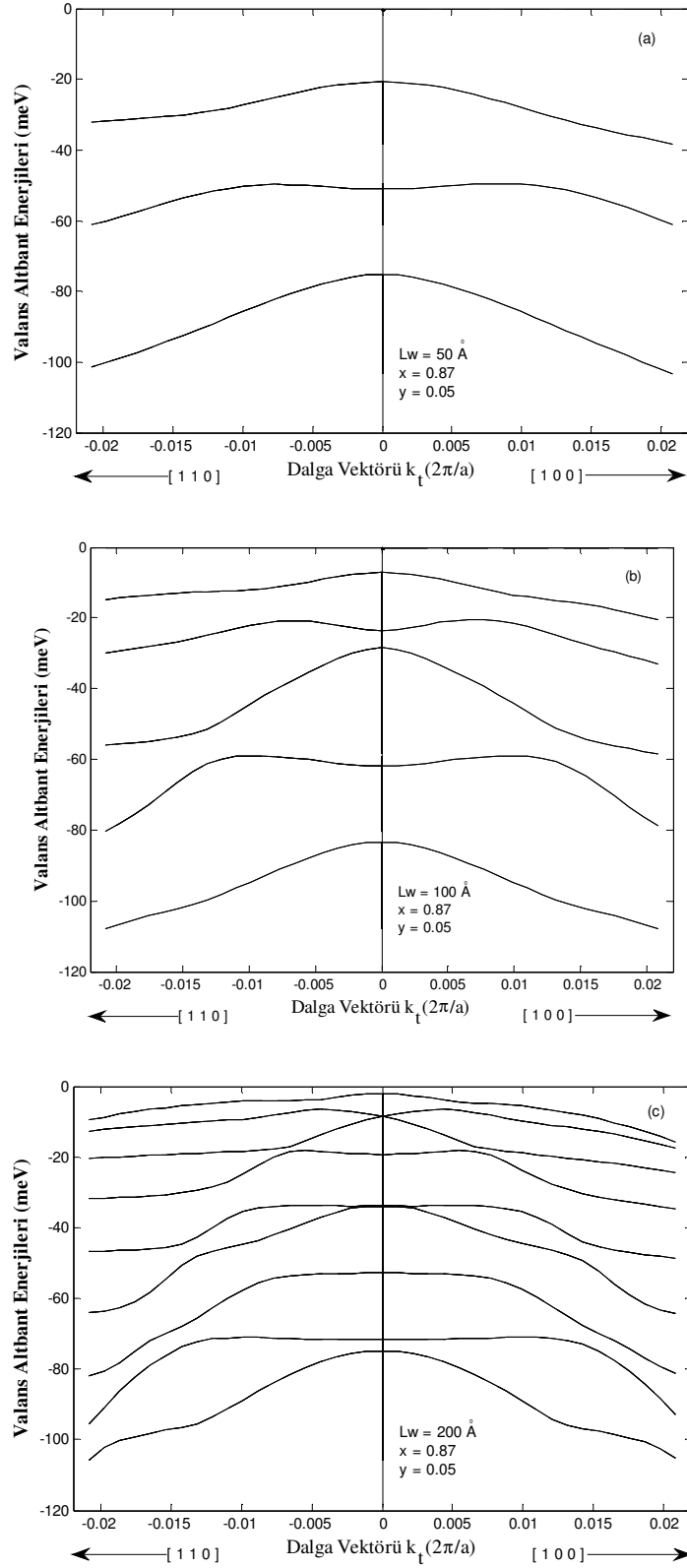
Şekil 5.4. Farklı indiyum konsantrasyonları için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.

Şekil 5.5 ve 5.6 (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 ve 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 genişlikler için sırası ile verilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi kuantum kuyusunun genişliğinin artması ile yapıda kuşatılan alt-bant durum sayısı artmıştır. Alt-bant durum sayısı ve enerjilerinin kuyu genişliği ile ayarlanabilir olması amaca uygun yeni optoelektronik devre elemanlarının tasarlanmasın da önemli bir ayar parametresidir. Ayrıca şekil 5.6 'ya bakıldığında küçük L değerleri için alt bantların k_t ile değişimi daha az iken, büyük L değerlerinde daha fazladır. Yani, küçük L değerlerindeki alt bantların k_t ile değişimlerinin benzeri büyük L değerlerinde daha küçük k_t değerlerinde görülmektedir. Şekil 5.6' daki diğer bir nokta da, alt bant enerjilerinin sadece düzlemdeki dalga sayısı k_t 'ye bağlı olmayıp aynı zamanda polar koordinatlardaki ϕ açısına da bağlı olmasıdır. Bu ϕ bağıllığı yüzünden de $k_x - k_y$ düzlemindeki alt bant enerji dağılımı anisotropiktir. Yani, [100] (veya [010]) doğrultusu boyunca alt bant enerji dağılımı ile [110] doğrultusu boyunca olan alt bant enerji dağılımı birbirinden farklıdır.

Sonuç olarak, kuyu genişliği, azot ve indiyum konsantrasyonlarını değiştirerek amaca uygun yeni elektro-optik devre elemanları tasarlanabilir.



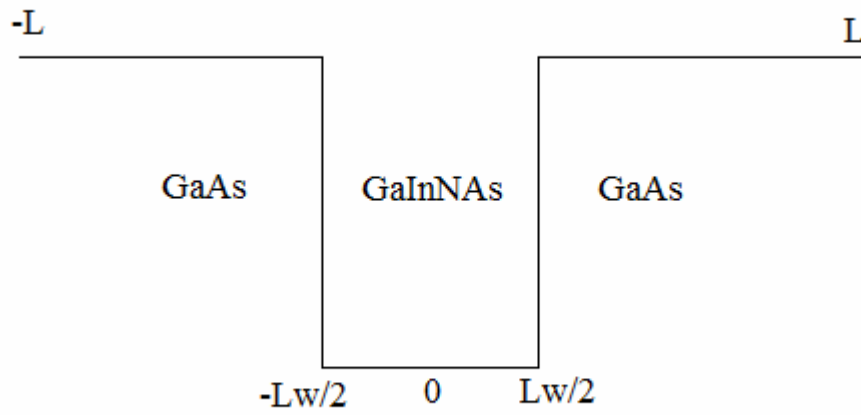
Şekil 5.5. Farklı kuyu genişlikleri için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun iletim alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.



Şekil 5.6. Farklı kuyu genişlikleri için $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi.

6. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ Tek Kuantum Kuyusundaki Donor Safsızlıklarının Bağlanma Enerjileri

Bu bölümde şematik gösterimi şekil 6.1’de verilen $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusundaki, elektron ve donör safsızlık atomunun oluşturduğu yapının bağlanma enerjisinin azot ve indiyum konsantrasyonuna ve z doğrultusundaki kuyu genişliğine bağlılığı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde varyasyonel yöntemle incelenecektir.



Şekil 6.1 GaInNAs/GaAs kuantum kuyusunun şematik gösterimi

z doğrultusunda kuşatılmış sistemin Hamiltonian’ı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde,

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m_w^*} + V(z) + V_c \quad (6.1)$$

şeklinde yazılır. $V(z)$ kuşatma potansiyeli,

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

ile verilir. Burada $Q_c = 0.80$ ve $\Delta E_g = E_g(GaAs) - E_g(GaInNAs)$ olarak alınmıştır.

Elektron ve safsızlık arasındaki Coulombik potansiyel,

$$V_C = \frac{-e^2}{\epsilon_w \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} \quad (6.3)$$

şeklinde yazılır. Burada (x_i, y_i, z_i) safsızlık atomunun konumunu, (x, y, z) ise elektronun konumunu göstermektedir. Elektronun momentum \vec{p} operatörü ve Coulombik potansiyel terimi yerine yazılırsa sistemin Hamiltonian'ı,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_w^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_w^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{\epsilon_w \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \quad (6.4)$$

şeklinde elde edilir.

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \phi \\ y &= \rho \sin \phi \\ z &= z \end{aligned} \quad (6.5)$$

dönüşümü yapılarak kutupsal koordinatlardaki Hamiltonian ifadesi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_w^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_w^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{\epsilon_w \sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} + V(z) \quad (6.6)$$

olarak elde edilir. Burada $\rho = \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}$, $(x-y)$ düzlemindeki elektron-donor safsızlık atomu arasındaki bağıl uzaklıktır. Hamiltonian'deki tüm uzunluklar etkin Bohr yarıçapı $(a_B = \frac{\epsilon_w \hbar^2}{m_w^* e^2})$ ve tüm enerji terimleri Rydberg $(R = \frac{m_w^* e^4}{2\epsilon_w^2 \hbar^2})$

cinsinden yazılarak boyutsuz Hamiltonian,

$$\tilde{H} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z}-\tilde{z}_i)^2}} + \tilde{V}(\tilde{z}) \quad (6.7)$$

biçiminde elde edilir. $Ga_x In_{1-x} N_y As_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusundaki elektron-donor safsızlık atomu için Schrödinger denklemi,

$$\tilde{H}\Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha, \beta) = \tilde{E}\Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha, \beta) \quad (6.8)$$

biçimindedir. Sistemi tanımlayan deneme dalga fonksiyonu,

$$\Phi(\tilde{z}, \tilde{\rho}, \alpha, \beta) = N\psi(\tilde{z}) e^{-\sqrt{\frac{\rho^2 + (z-z_i)^2}{\alpha^2 + \beta^2}}} \quad (6.9)$$

şeklinindedir. Burada, N normalizasyon sabiti, α ve β varyasyon parametreleri ve $\psi(\tilde{z})$ elektronun z doğrultusundaki hareketini tanımlayan dalga fonksiyonudur.

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

$$\varphi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos \left[\frac{n\pi}{L_b} \tilde{z} - \delta_n \right] \quad (6.10)$$

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

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - \text{tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n - \text{çift ise} \end{cases} \quad (6.11)$$

değerlerini alır. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z}) \quad (6.12)$$

biçimindedir. N normalizasyon sabiti ise,

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_{-L}^L \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \rho \psi(\tilde{z})^2 e^{-2\sqrt{\frac{\rho^2}{\alpha^2} + \frac{(z-z_i)^2}{\beta^2}}} d\phi d\rho dz}} \quad (6.13)$$

şeklindedir. Sistemin toplam enerjisi,

$$\tilde{E} = \min_{\alpha, \beta} \langle \Phi | \tilde{H} | \Phi \rangle \quad (6.14)$$

eşitliğinden elde edilir. Burada \tilde{E} özdeğerini minimum yapan α, β varyasyon parametrelerinin değerleri belirlenir. Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H} \rangle = & \langle \Phi | -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} | \Phi \rangle + \langle \Phi | -\frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} | \Phi \rangle + \langle \Phi | -\frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} | \Phi \rangle + \langle \Phi | -\frac{\partial^2}{\partial z^2} | \Phi \rangle + \\ & \langle \Phi | \tilde{V}(\tilde{z}) | \Phi \rangle + \langle \Phi | \frac{-2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} - \tilde{z}_i)^2}} | \Phi \rangle \end{aligned} \quad (6.15)$$

olmak üzere taban durumunda bulunan safsızlık atomunun bağlanma enerjisi ise boyutsuz olarak,

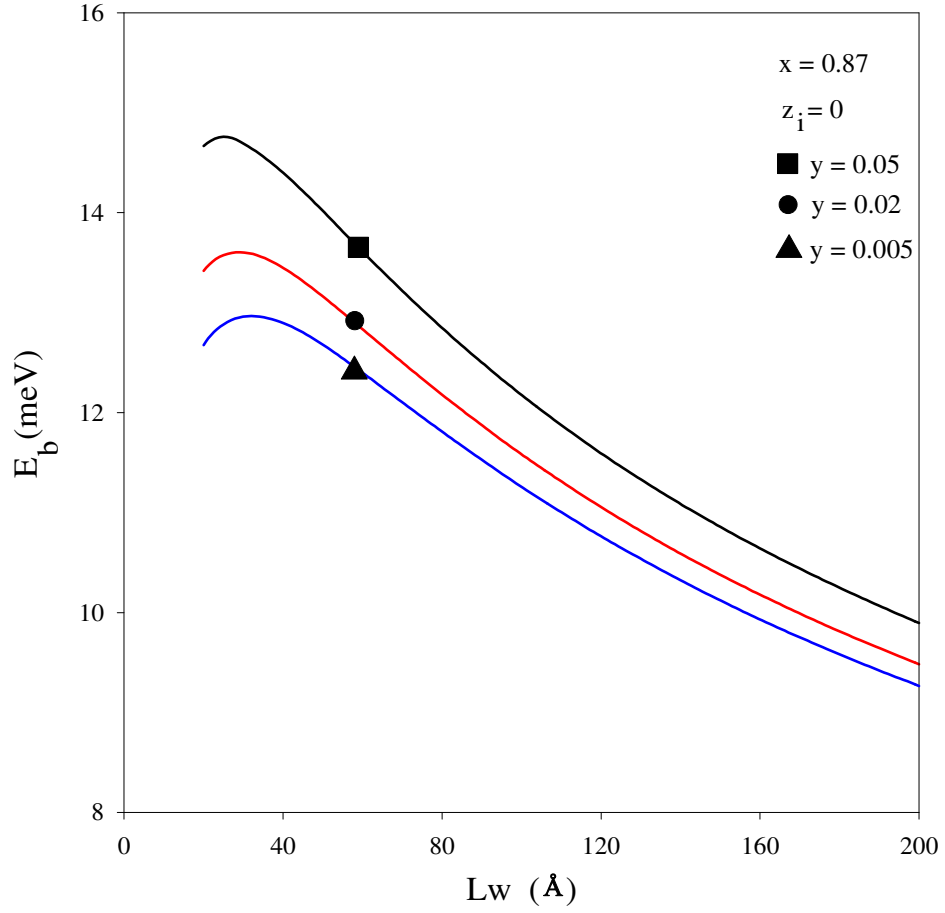
$$\tilde{E}_B = \tilde{E}_z - \langle \tilde{H} \rangle \quad (6.16)$$

ile verilir. Burada \tilde{E}_z elektronun z doğrultusundaki hareketine karşılık gelen taban durum enerjisidir.

Tez çalışmamızda, incelediğimiz $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusu sisteminin fiziksel parametreleri değiştirilerek elektron taban durum enerji seviyeleri ve safsızlık atomunun bağlanma enerjisi hesaplanmıştır.

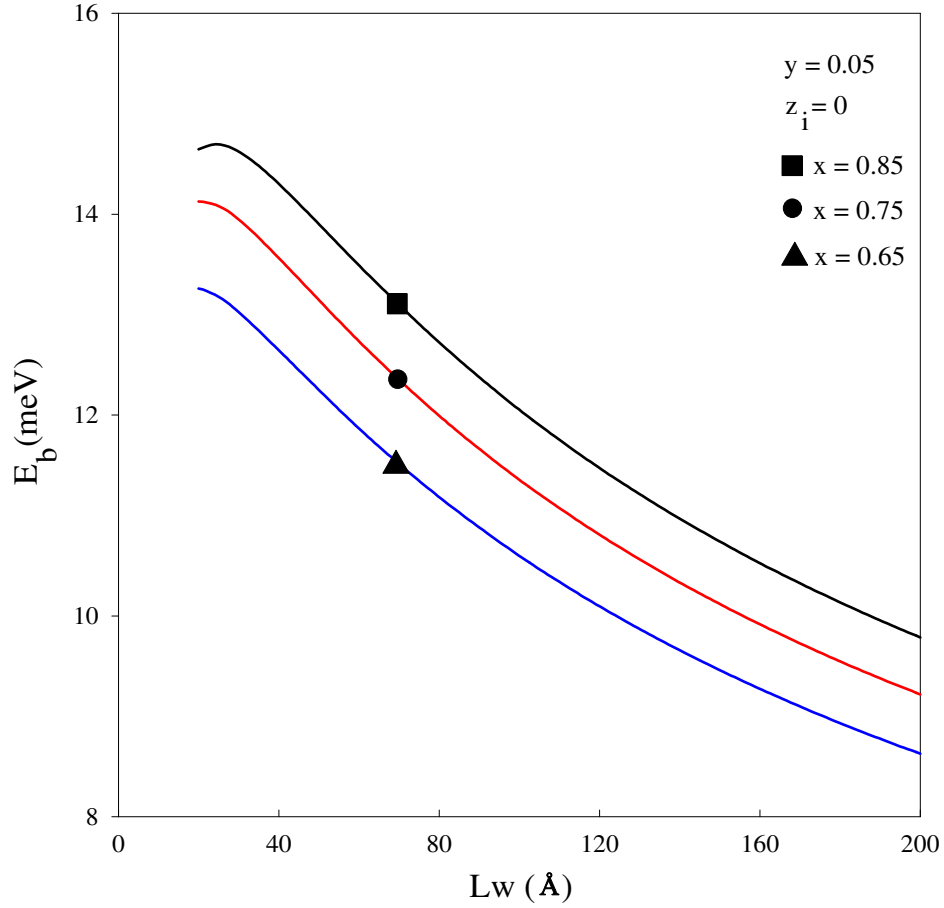
Çalışmamız da ilk olarak kuantum kuyusunun merkezindeki donör safsızlık atomu ($x_i = y_i = z_i = 0$) için bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi sabit bir indiyum konsantrasyonu ve farklı azot konsantrasyonları için incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar şekil 6.2 'de verilmiştir. Kuyu genişliği artıkça, bağlanma enerjisi bir maksimuma ulaşıncaya kadar artar ve sonra azalmaya başlar. Bağlanma enerjisinin maksimum olduğu Lw değerleri için sistem yarı-iki boyutlu karaktere sahiptir ve elektron ile safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı fazladır. Çok büyük Lw değerlerinde ise, büyütme doğrultusundaki kuşatma azalır ve safsızlık atomunun bağlanma enerjisi üç-boyutlu sistemdeki değerine yaklaşır. Bu nedenle geniş kuyularda elektron ve safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılığı çok küçüktür. Ayrıca çok küçük Lw değerlerinde elektron çok enerjik olduğundan potansiyel engellerine sızmaları artar ve sistem çok büyük Lw değerlerinde olduğu gibi yeniden üç-boyutlu karaktere sahip olur. Bundan dolayı da çok küçük Lw değerleri için bağlanma enerjisi azalacaktır.

Şekil 6.2 de görüldüğü gibi azot konsantrasyonunun artması bağlanma enerjisini artırmaktadır. Azot konsantrasyonunun artması sistemdeki kuşatma potansiyelini büyüteceğinden, elektron ile safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileşimi artıracak ve bu nedenle safsızlık atomunun bağlanma enerjisi artacaktır.



Şekil 6.2. Farklı azot konsantrasyonları için, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi

Şekil 6.3 te merkezi donör safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin sabit bir azot konsantrasyonu ve farklı indiyum konsantrasyonları için kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. İndiyum konsantrasyonundaki artış, kuşatmayı artırırken elektronun etkin kütlelerini azaltmaktadır. Yüksek indiyum konsantrasyonlarında elektron daha enerjik olduğundan bariyerlere sızması fazladır. Bu sonuçla da safsızlık bağlanma enerjisi indiyum konsantrasyonunun artması ile azalmaktadır.



Şekil 6.3. Farklı indiyum konsantrasyonları için, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi

7. Yoğun Lazer Alanı (ILF) Altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ /GaAs Tek Kuantum Kuyusunun Elektronik Yapısı

Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin elektriksel ve optiksel özellikleri üzerine dış elektromanyetik alanların (EM) etkilerini anlamak, yeni geliştirilecek aygıtların tasarlanması için çok önemlidir. Bu konunun, teknolojide uygulanabilir olması nedeni ile son zamanlarda yoğun bir ilgi alanı olmuştur [50]. Bilindiği gibi, bir yarıiletken nano-yapı sistemine, dış bir elektrostatik ya da manyetik alan uygulandığında, yarıiletken nano-yapıdaki kuşatılmış taşıyıcıların kuantum durumları değişir [51–52]. Son zamanlarda, serbest elektron lazerleri (FELs) gibi yüksek güçlü ayarlanabilir lazer kaynaklarının geliştirilmesi, yarıiletken nano-yapılardaki kuşatılmış taşıyıcılar ile yoğun lazer alanının (ILFs) etkileşmesi üzerine aktif araştırmaları yoğunlaştırmıştır [53]. Bu etkileşmenin incelenmesi ile

- Dinamik Franz-Keldysh etkisi (DFKE) ile kuantum telleri ve kuyularındaki elektron durum yoğunluğundaki (DOS) değişimler [54–56]
- Mikrodalga ışınımı altında iki boyutlu elektron gazındaki (2DEGs) sıfır dirençli durumların ölçülmesi [57]
- Yarıiletkenlerdeki enerji bant aralığının değişimi [58]
- Optiksel soğurma spektrumundaki kuvvetli deformasyonu [59]
- Kuantum kuyularındaki THz rezonans soğurması [60]
- Tek duvarlı karbon nanotüplerdeki Floquet-Bloch durumları [61]

gibi ilginç fiziksel olaylar keşfedilmiştir.

Kuantum kuyularında, bantlar arası ışımali birleşme (elektron-hole) [62–63], bant-ıçi geçişler [64], hidrojenik safsızlık seviyeleri [65–70], elektron durum yoğunluğu [55], rezonans tünelleme [71] ve kuantum kuyu lazerlerinin ayarlanması [72] gibi çalışmalar için geliştirilen modellerde, bağıli durumlar ve kuşatma potansiyeli üzerine yüksek frekanslı yoğun lazer alanının (ILF) etkisinin hesaplanması önemlidir. Bu etkinin hesabı yeterince yüksek frekanslar için Fourier-Floquet potansiyel seri açılımının sıfırcı mertebe teriminin baskın olduđu Kramers-Henneberger (KH) öteleme dönüşümünü temel alan pertürbatif olmayan yaklaşımla yapılır. Bir kuantum kuyusundaki kuşatılmış elektronlar, heteroyapının ara yüzeyine dik polarizeli rezonans olmayan bir ILF alanı tarafından oluşan potansiyele, lazer etkili giydirilmiş lazer potansiyeli (dressed-potential) olarak adlandırılır [65,71–72]. Bu potansiyelin tanımı

için bazı temel analitik yaklaşımlar gereklidir [65–67,70]. Yapılan çalışmaların çoğunda, lazer etkili potansiyel için integral ifadesi Ehlitzky tarafından önerilen yaklaşımlar kullanılarak çözülebilmektedir [73]. Ancak Kramers-Henneberger (KH) öteleme dönüşümünü temel alan pertürbatif olmayan yaklaşımla yapılan bazı son çalışmalar bu sistemlerdeki integralin analitik olarak çözülebileceğini göstermiştir [55,68,69,62]. Potansiyel kuyusunun duvarları hem lazer frekansı hem de lazer yoğunluğuna bağlı α_0 lazer alanı parametresinin artması ile tahmin edilenden daha fazla bozulmaktadır. Bugüne kadar yapılan bütün teorik çalışmalar yalnızca $\alpha_0 \leq \frac{Lw}{2}$ için (Lw kuyu genişliğidir) yapılmıştır. Bugünkü lazer teknolojisi ile on nanometreye kolayca ulaşabilen lazer demetleri elde edilebildiğinden $\alpha_0 > \frac{Lw}{2}$ durumlarının araştırılması ve bütün bağlı durumlar için enerji kaymasının sistematik bir incelenmesi yapılabilir. Literatürdeki çoğu teorik çalışmaların eksikliği, DFKE etkisi ile bütün enerji seviyelerin eşit oranda maviye kayması gerçeği nedeni olabilir ve $\alpha_0 > \frac{Lw}{2}$ genişliğinde ILFs altındaki kuantum kuyularının fiziğinde herhangi bir yenilik getirmeyeceği inandırıcıdır.

Bu çalışmada ilk olarak yüksek frekanslar için bütün $\alpha_0 > 0$ değerleri için geçerli lazer etkili potansiyel ifadesi kapalı formda sunulacak. İkinci kısımda lineer polarize rezonans olmayan ILF'nin $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki elektronların bağlı durumları ve kuyu potansiyeline etkileri incelenecek üçüncü kısımda ise ILF alanı altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomlarının bağlanma enerjisinin kuyu genişliği, azot ve indiyum konsantrasyonları ile değişimi incelenecektir.

7.1. Yüksek Frekanslı Yoğun Lazer Alanı Altındaki Kuantum Kuyusundaki Elektronlar

Benzer örgüye sahip materyaller arasında yapılan ekleme ile iletim ve valans bantlarında süreksizlikler meydana gelir. Bu süreksizlikler tekrarlanarak kuantum çukuru/ çukurlarını oluşturur ve böylece yük taşıyıcılarının büyütme doğrultusunda hareketini sınırlayarak kuşatmaya neden olurlar. Bu yapı içerisinde artık kuantum etkileri söz konusu olur ve enerji kesikli bir spektrum oluşturur. Bir L_w genişlikli GaInNAs tabakası enerji bant aralığı daha büyük iki GaAs tabakası arasına koyarak z doğrultusunda bir büyütme yapılırsa, L_w genişlikli bir kuantum kuyu potansiyeli oluşturulabilir. Katkısız bir heteroyapı için bir kare kuantum kuyusu $V_b(z) = V_0 \times \Theta(|z| - l)$ şeklinde tanımlanan bir formdadır. Burada $l = L_w/2$, $\Theta(z)$ step fonksiyonu ve V_0 GaInNAs ve GaAs yarıiletken malzemeleri arasındaki iletim bandı süreksizliği ile ilişkili potansiyel kuyusunun derinliğidir.

Bu kuantum kuyusu, z -ekseni boyunca lineer polarize monokromatik bir elektromanyetik alan ile ışınlanırsa, sistemin elektronik durumları Hamiltonian operatörünün kinetik kısmına dış elektromanyetik alanla ilişkili potansiyel teriminin eklenmesi ile çözülebilir. Burada bu yarı-klasik olarak yapılacaktır, yani radyasyon alanının klasik bir tanımı ile parçacık hareketinin kuantum tanımının birleştirilmesi ile zamana bağlı Schrödinger denklemi,

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

şeklinindedir. Burada $\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}$ momentum operatörü ve $\vec{A} = \vec{A}(z, t)$ elektromanyetik alan için vektör potansiyelidir. Uzayın fiziksel bölgesinde değişimin belirli olmadığı alanlar için dipol yaklaşımı uygulanır ve $\vec{A}(z, t) = \vec{A}(t)$ olarak alınır. Coulomb ayarında,

elektromanyetik alan $\vec{F} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ şeklinde vektör potansiyeli ile ifade edilir. Herhangi bir

$A(t)$ titreşimi için, zamana bağlı Schrödinger denkleminin sol tarafındaki Hamiltonian operatöründeki kinetik terimdeki zamana bağıllık KH birim dönüşüm ile potansiyel terime transfer edilir. Bu işlem $\varphi(z, t) = U^\dagger \psi(z, t)$ ve $\tilde{H} = U^\dagger H U$ yapılarak elde edilir.

Burada,

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

KH dönüşüm operatörü ve H Hamiltoniandır [74–76]. Bu sonuçla zamana bağlı Schrödinger denklemi,

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

şekline dönüşür [55]. Burada $\alpha(t) = \frac{e}{m^*} \int_t A(t') dt'$ [77] dür. Basitleştirmek için biz t'ye

harmonik bağlı bir monokromatik EM alan $\bar{A}(t) = A_0 \cos(\omega t) \hat{z}$ ele alalım. Burada

$A_0 = F_0 / \omega$, F_0 alanın şiddetidir. Bu alan $\alpha_0 = \frac{eF_0}{m^* \omega^2}$, $\alpha(t) = \alpha_0 \sin(\omega t)$ sahiptir [77].

Bir EM alan varlığında elektron hareketini tanımlayan denk (7.3) alan fazındaki dalgalanmaların Kramer çerçevesindeki $V_b [z + \alpha(t)] = V_0 \Theta(|z + \alpha_0 \sin \omega t| - l)$ potansiyeli ile etkileşen elektronların alternatif bir tanımı olabilir [78–79]. Bu periyodik potansiyel bir Fourier-Floquet serisine açılabilir ve yeterince yüksek frekanslar için sıfırıncı

mertebe terimi baskındır [77–78]. Bu terim $\frac{1}{T} \int_0^T V_b [z + \alpha_0 \sin \omega t] dt$ zaman ortalaması ile

ilişkilidir. Burada $T = \frac{2\pi}{\omega}$ radyasyon alanının periyodudur [55,65,79]. Bu ifade kare

kuantum kuyu potansiyeli ile ilişkili lazer etkili potansiyel ifadesidir. Lazer etkili potansiyel terimi analitik olarak çözümlenerek,

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

şeklinde elde edilmiştir. Burada $V_b (z + y) = V_0 \Theta(|z + y| - l)$ şeklindedir. Denk (7.4) de

$\tilde{z} = z + y$ değişken dönüşümü yapılırsa,

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

elde edilir. Bu integral $|\tilde{z}| \geq l$ değerlerinde $\langle V \rangle_{(z;\alpha_0)} = V_0$ değerine eşittir. Bu potansiyel kuyusunun $|z| \geq l + \alpha_0$ noktalarda bozulmadığı anlamına gelir. Şimdi biz dikkatimizi $|z| < l + \alpha_0$ noktasına sınırlarsak denk (7.5) deki lazer etkili potansiyel ifadesi,

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

şeklinde yazılır. Denk (7.6) deki integral ifadelerinin çözümleri

$\left(\int \frac{dx}{\sqrt{a^2 - x^2}} = \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) \right)$ yerine yazılırsa, denk (7.6) ifadesi,

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

şeklinde elde edilmiş olur. Sonuç olarak, $|x| \leq 1$ olan bütün x değerleri için geçerli olan $\arcsin x + \arccos x = \pi/2$ rad ifadesinden de yararlanarak lazer etkili potansiyel ifadesini,

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

olarak elde edilmiş olur. Bu lazer etkili potansiyel terimi ile yazılan kuantum kuyusu için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \langle V \rangle_{(z;\alpha_0)} \varphi(z) = E\varphi(z) \quad (7.9)$$

şeklindedir. Buradaki E lazer alanı altındaki enerji seviyeleridir.

7.2 Yoğun Lazer Alanı (ILF) Altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ Tek Kuantum Kuyusunun Potansiyel Profilleri ve Altbant Enerjileri

Bu bölümde yoğun lazer alanı (IFL) altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli ve alt-bant yapısının üzerine azot ve indiyum konsantrasyonunun etkisi incelenecektir.

$Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusu için boyutsuz Schrödinger denklemi,

$$-\frac{d^2\psi(\tilde{z})}{d\tilde{z}^2} + \langle \tilde{V} \rangle_{(\tilde{z};\alpha_0)} \psi(\tilde{z}) = \tilde{E}\psi(\tilde{z}) \quad (7.10)$$

biçiminde yazılır. Burada $\langle \tilde{V} \rangle_{(\tilde{z};\alpha_0)}$ lazer etkili potansiyel ifadesidir. 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,

$$\varphi_n(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{L_b}} \cos \left[\frac{n\pi}{L_b} \tilde{z} - \delta_n \right] \quad (7.11)$$

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

$$\delta_n = \begin{cases} 0 & n - \text{tek ise} \\ \frac{\pi}{2} & n - \text{çift ise} \end{cases} \quad (7.12)$$

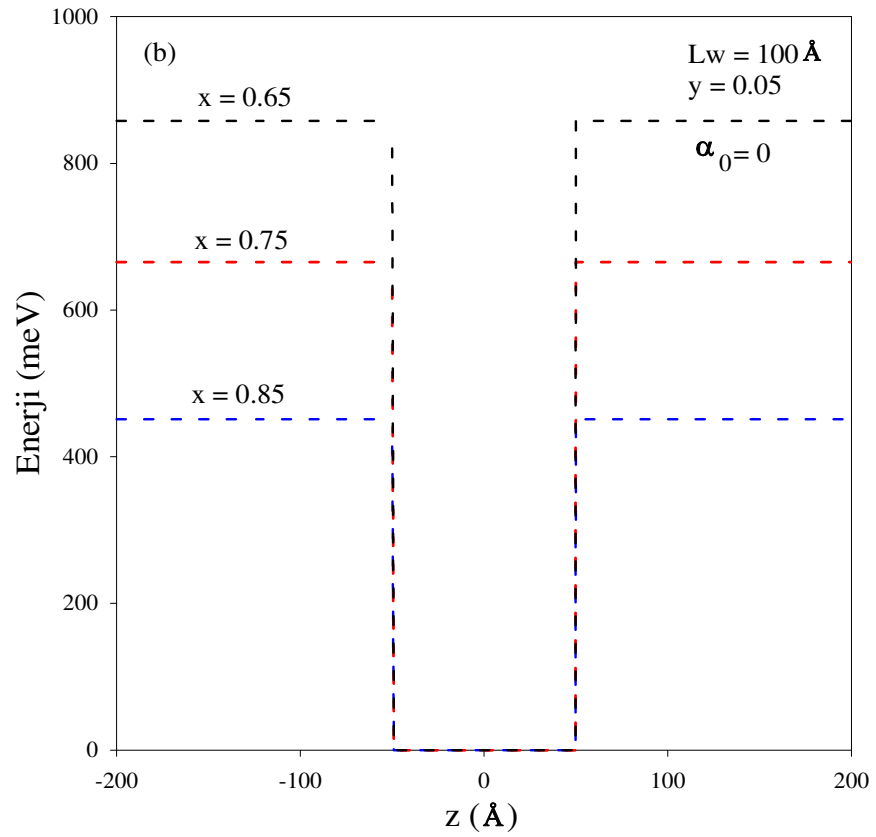
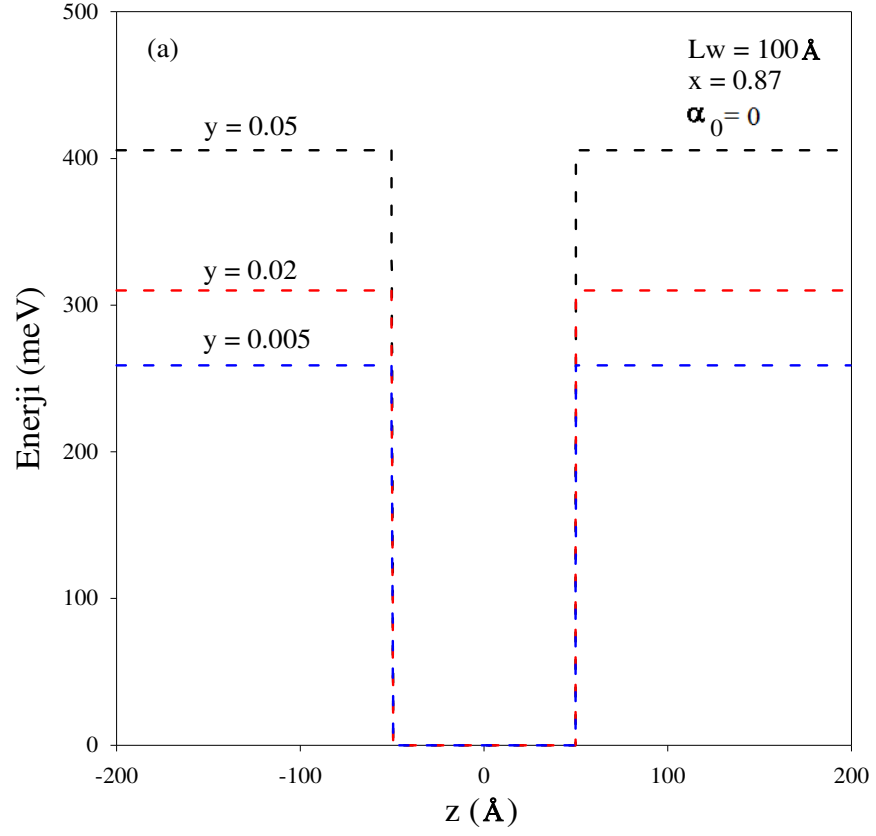
değerlerini alır. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\psi(\tilde{z}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\tilde{z}) \quad (7.13)$$

biçimindedir. Boyutsuz Hamiltonian'ın beklenen değeri,

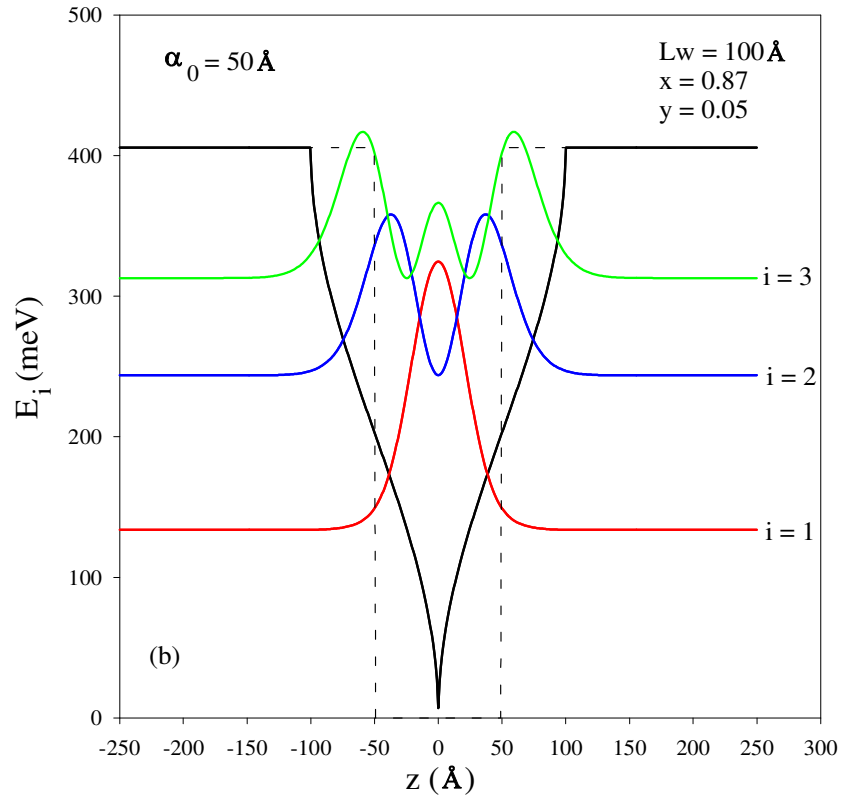
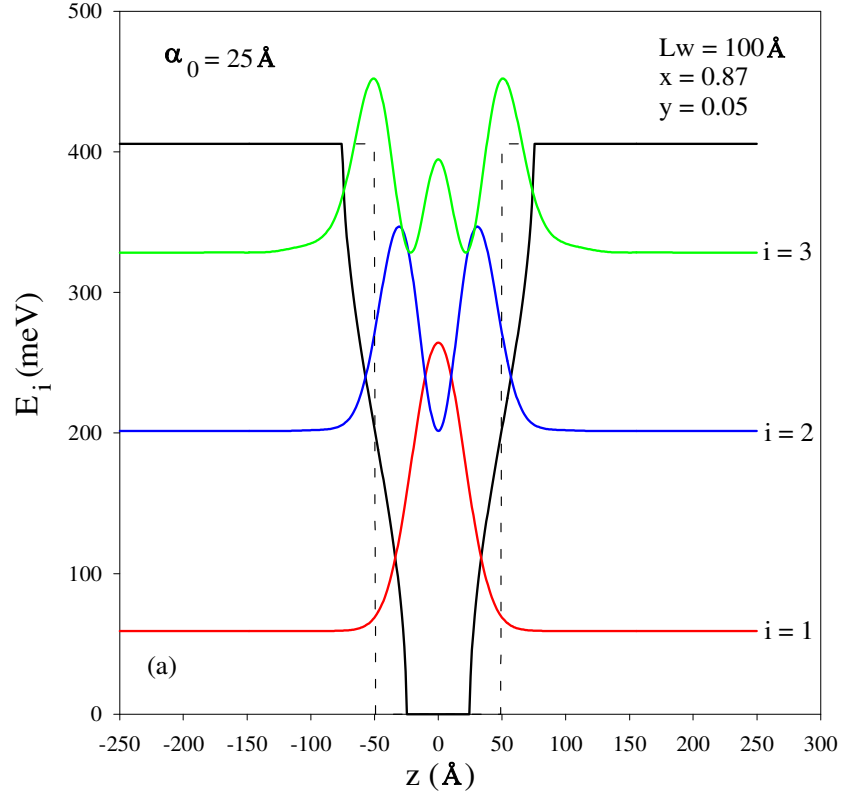
$$\tilde{E} = \langle \psi | -\frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + \langle \tilde{V} \rangle_{(\tilde{z};\alpha_0)} | \psi \rangle \quad (7.14)$$

biçiminde elde edilir. Yukarıdaki anlatılan yaklaşımlar sonucunda elde edilen analitik denklemler bilgisayar programları yardımıyla çözülmüştür. Yoğun lazer alanı altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusunun azot ve indiyum konsantrasyonları değiştirilerek kuşatma potansiyelleri incelenmiştir. Daha sonra lazer alanının büyüklüğü değiştirilerek sistemin lazer etkili potansiyeli ve alt-bant enerjilerindeki değişimler incelenmiştir.

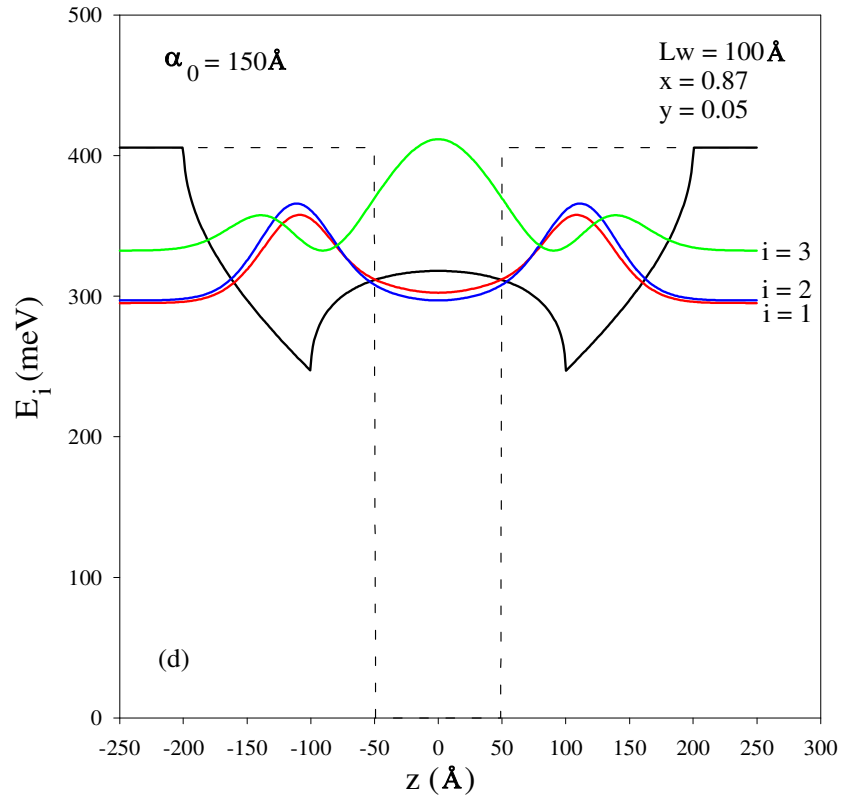
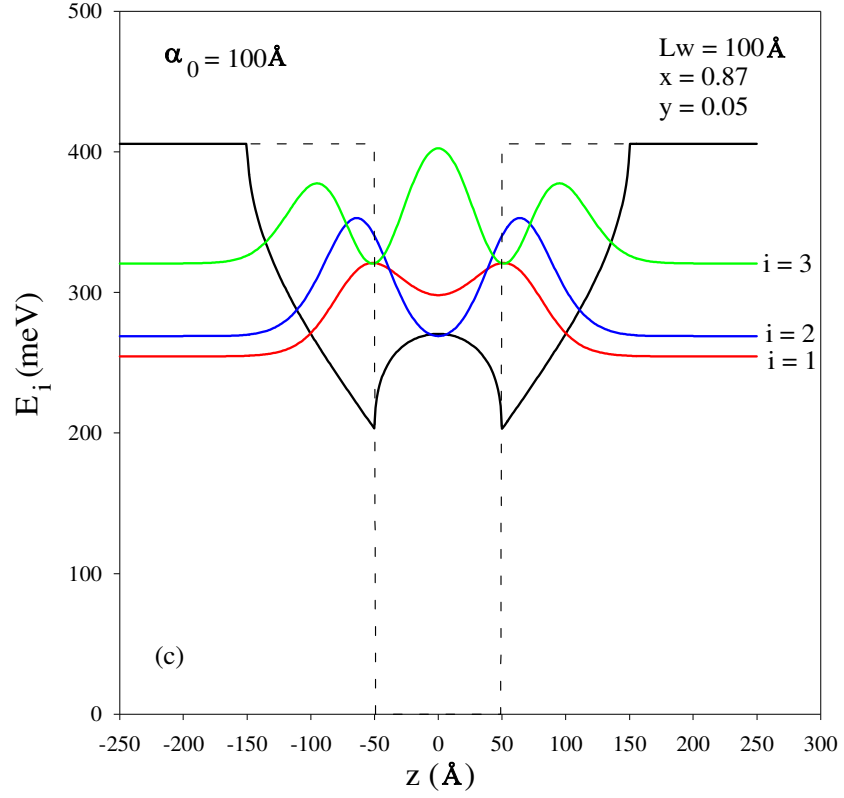


Şekil 7.1. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyelinin (a) azot (b) indiyum konsantrasyonlarına göre değişimi

Şekil 7.1 (a) ve (b) de $Lw=100\text{Å}$ 'luk $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun kuşatma potansiyelinin azot ve indiyum konsantrasyonlarına göre değişimi verilmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda, sabit bir indiyum konsantrasyonu için azot konsantrasyonunun artırılması ile $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ malzemesinin iletim bant süreksizliği ve elektron etkin kütlesi artarken dielektrik sabiti azalmaktadır. Benzer şekilde sabit bir azot konsantrasyonu için indiyum konsantrasyonunun artırılması ile $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ malzemesinin iletim bant süreksizliği ve dielektrik sabiti artarken, elektron etkin kütlesinin azaldığı görülmüştür. Bu sonuçlar ve şekillerden de görüldüğü gibi yapıdaki azot ve indiyum konsantrasyonu artırıldığı zaman $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ malzemesinin bant aralığının hızla azaldığı ve buna bağlı olarak ΔEg 'in hızlı bir şekilde arttığı görülmüştür. Bu sonuçla azot ve indiyum konsantrasyonunun artırılması ile oluşan iletim bandındaki bant kaymasının büyümesi, kuşatma potansiyelinin derinleşmesine ve taşıyıcıların daha iyi kuşatılmalarına sebep olmuştur. Bu da gösteriyor ki azot ve indiyum konsantrasyonu sistem için birer ayar parametresidir. Bu ayar parametreleri ile oynanarak istenilen özelliklere sahip cihazların tasarlanması mümkündür.



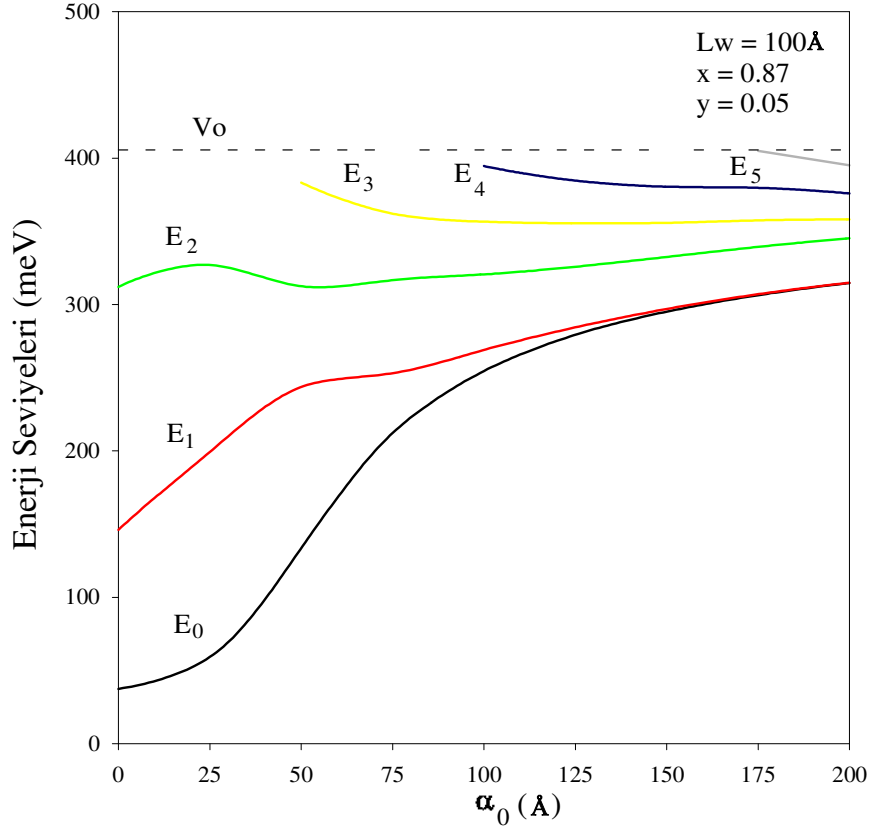
Şekil 7.2. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi (a) $\alpha_0 = 25 \text{ \AA}$ (b) $\alpha_0 = 50 \text{ \AA}$



Şekil 7.3. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun lazer etkili potansiyel profili, enerji düzeyleri ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi (c) $\alpha_0 = 100 \text{ \AA}$ (d) $\alpha_0 = 150 \text{ \AA}$

Şekil 7.2 (a) ve (b) de $Lw = 100 \text{ \AA}$ 'luk $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyu potansiyeli profili ve alt-bant enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karelerinin lazer alanına göre değişimi verilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi 0 ve $Lw/2$ aralığında verilen α_0 değerleri için kuyu genişliği $Lw - 2\alpha_0$ (kuyunun tabanı) dan $Lw + 2\alpha_0$ (kuyunun üst noktası) na doğru düzgün bir şekilde artmaktadır. α_0 'ın $\alpha_0 = Lw/2$ kadar artması ile elde edilen belirgin enerji kaymalarının nedeni şu şekilde açıklanabilir; $V_0/2$ den küçük enerjili durumlar Lw kuyu genişliğinden daha küçük etkin kuyu genişliği hisseder, böylece enerjiler maviye kayar. Diğer taraftan $V_0/2$ den büyük enerjili durumlar Lw kuyu genişliğinden daha büyük etkin kuyu genişliği hisseder, böylece enerjiler kırmızıya kayar.

$\alpha_0 > Lw/2$ durumu daha karmaşıktır. Şekil 7.3 (c) ve (d) den görüldüğü gibi arccos fonksiyonlarının üst üste binmesi $z = -\alpha_0 + Lw/2$ ve $z = \alpha_0 - Lw/2$ arasında bir tepe formunda kuyu tabakası içinde parabolik bir engel yaratır. α_0 arttıkça engelin tepe yüksekliği de artar. Engelin tepesi $V(\alpha_0) = \frac{2V_0}{\pi} \times \arccos\left(\frac{Lw}{2\alpha_0}\right)$ potansiyel değeri ile her zaman kuantum kuyusunun merkezine ($z = 0$) yerleşmiştir. Engelin alt noktaları $\frac{V_0}{\pi} \times \arccos\left(\frac{Lw}{\alpha_0 - 1}\right)$ potansiyel değerleri ile $z = -\alpha_0 + Lw/2$ ve $z = \alpha_0 - Lw/2$ noktalarındadır. Bu ifadelerden de kolayca görülebileceği gibi engelin tepe ve alt noktası büyük α_0 değerlerinde V_0 değerine eğilimlidir. Bu da bütün bağlı enerji seviyelerinin bu limitlerde V_0 'a kayacağı anlamına gelecektir. Taban durum dalga fonksiyonunun bulunma olasılığı ise α_0 'ın artması ile oluşan engel tepesinin büyümesi nedeni ile tek yerine iki pik vermeye başlamaktadır. 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 birbirlerine yaklaşır.



Şekil 7.4. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki alt bant enerji seviyelerinin yoğun lazer alanına göre değişimi

Şekil 7.4 $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun yoğun lazer alanının artması ile bağlı durumların nasıl değiştiğini göstermektedir. Bu şekil ileride yapılacak olan bantlar arası geçişler için iyi bir rehber olmasının yanı sıra yarıiletken kuantum kuyu potansiyelinin tek kuyudan çift kuyuya geçişini de göstermektedir. Şekilden de görüldüğü gibi en düşük iki enerji seviyesi α_0 'ın artması ile maviye doğru kaymakta ve büyük α_0 'larda birleştikleri açıkça görülmektedir. Yeterli büyüklükteki α_0 'lar için ekstra bağlı durumların oluştuğu da şekilde açıkça görülmektedir. Bu özellik optiksel pompalama lazer projelerinde çalışan bir kuantum kuyu lazer sistemindeki nüfus tersinmesinin kontrolü için temel olarak alınabilir. Uyarılmış durumlar arasındaki yakınlık nüfus tersinme oranını araştırmak için hesaplanabilir. Sonuç olarak, yukarıdaki anlatılan bu özellikler kullanılarak daha verimli lazer sistemlerinin tasarlanması mümkündür.

7.3 Yoğun Lazer Alanı (ILF) Altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ Tek Kuantum Kuyusundaki Donor Safsızlıklarının Bağlanma Enerjileri

Bu bölümde yoğun lazer alanı (ILF) altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusundaki donör safsızlık atomunun bağlanma enerjilerinin lazer alanının şiddetine, indiyum ve azot konsantrasyonlarına ve donör atomlarının konumlarına bağlılığı incelenecektir.

z -doğrultusunda kuşatılmış sistemin Hamiltonian'ı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde,

$$H = -\frac{\vec{P}^2}{2m_w^*} + \langle \tilde{V} \rangle_{(z;\alpha_0)} + V_C \quad (7.15)$$

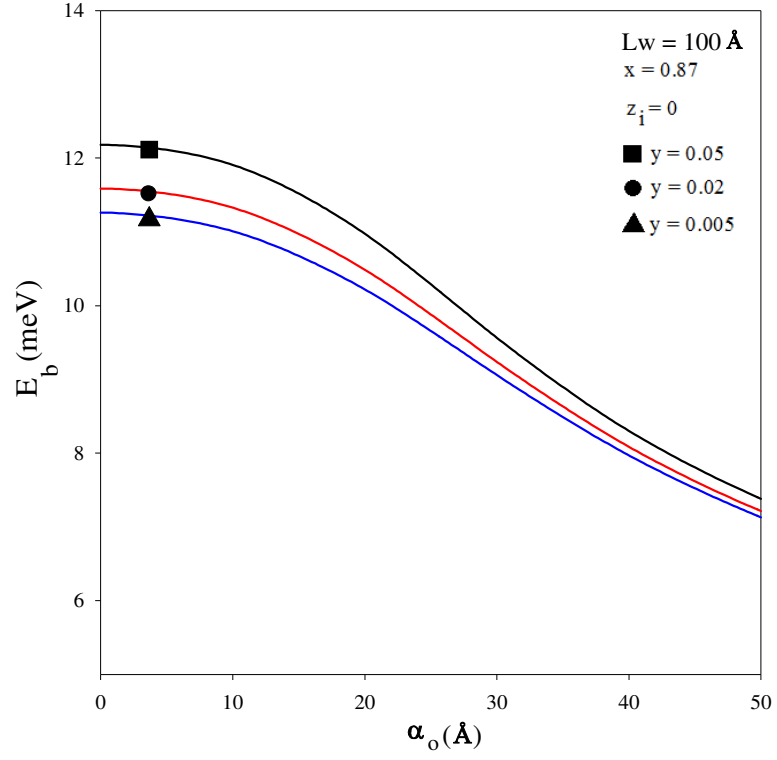
şeklinde yazılır. Burada,

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

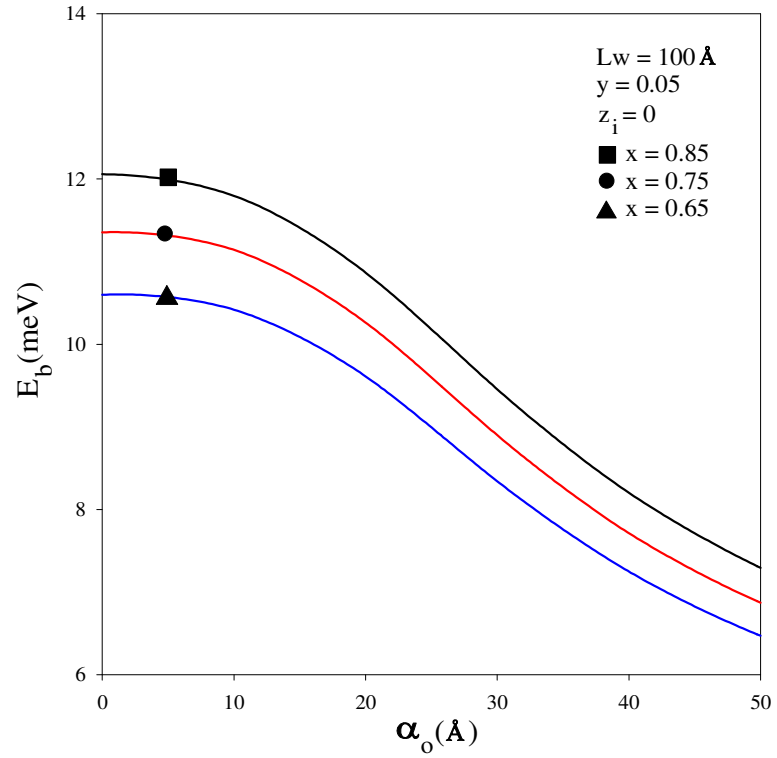
lazer etkili potansiyel ifadesidir. Elektron ve safsızlık arasındaki Coulombik potansiyel,

$$V_C = \frac{-e^2}{2\epsilon_w} \left[\frac{1}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i - \alpha_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i + \alpha_0)^2}} \right] \quad (7.16)$$

şeklinde yazılır. **Bölüm 6**'de ayrıntılı olarak anlatılan yaklaşımlar sonucunda elde edilen analitik denklemler bilgisayar programları yardımıyla çözülmüştür. Yoğun lazer alanı altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyusunun azot ve indiyum konsantrasyonları değiştirilerek donör safsızlıklarının bağlanma enerjilerinin lazer alanı ile değişimi incelenerek aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır.

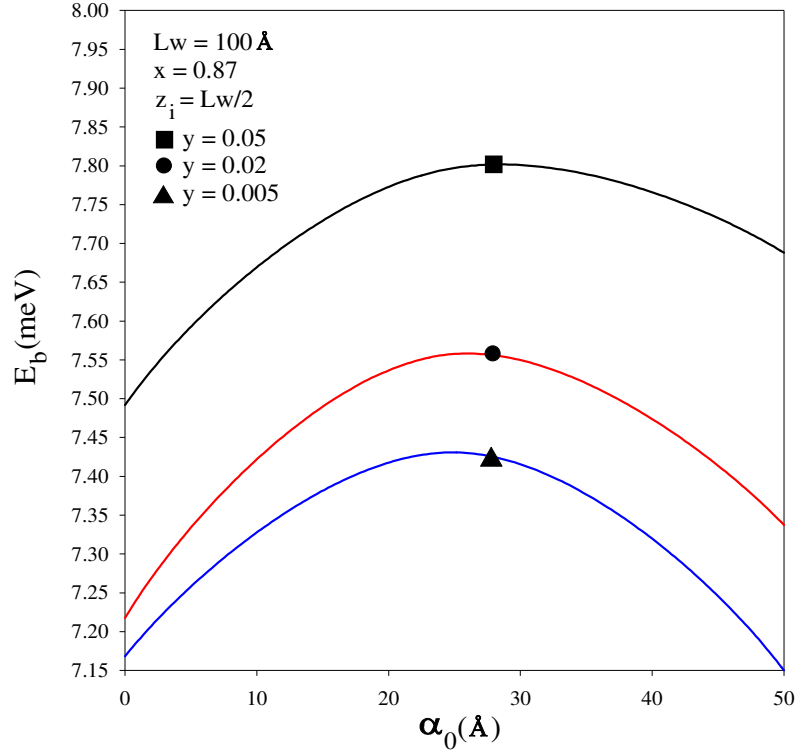


(a)

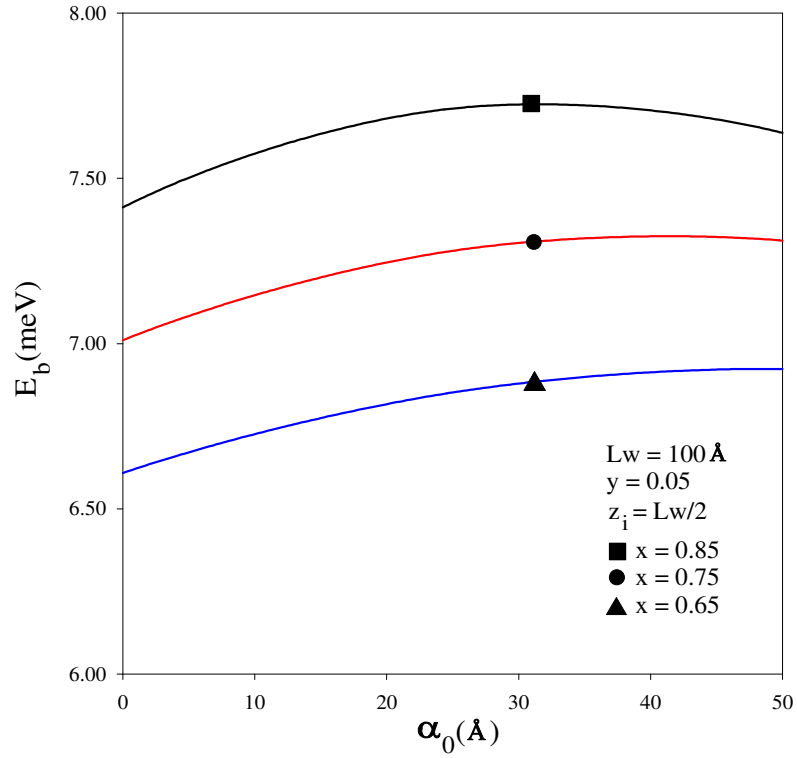


(b)

Şekil 7.5. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı (a) Azot ve (b) İndiyum konsantrasyonlarında α_0 'a göre değişimi



(a)



(b)

Şekil 7.6. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusundaki kuyu kenarındaki safsızlık atomunun bağlanma enerjisinin farklı (a) Azot ve (b) İndiyum konsantrasyonlarında α_0 'a göre değişimi

Şekil 7.5 (a) ve (b) de azot ve indiyum konsantrasyonları değiştirilerek merkezi donör atomu ($x_i = y_i = z_i = 0$) için bağlanma enerjisinin α_0 ' a göre değişimi verilmiştir. Her iki şekilden de görüldüğü gibi α_0 'nın büyümesi bağlanma enerjisinde azalmaya neden olmuştur. Bağlanma enerjisindeki bu azalışın sebebi lazer alanının kuşatma potansiyeli üzerindeki etkisidir. Lazer alanının artması ile kuşatma potansiyelinde, lazer alanının büyüklüğü kuyu genişliğinin yarısına eşit olana kadar kuyu tabanında bir daralmaya neden olur (bakınız şekil 7.2). Bu daralmanın etkisi ile bağlı durum enerji seviyeleri daha yüksek enerji seviyelerine kayar. Bu durumda elektron çok enerjik olduğu için bariyerlere sızmalar meydana gelir. Böylece elektron ve donör safsızlık atomunun birbirlerini ayın düzlemde görme olasılığı azaldığından bağlanma enerjisinde bir azalmaya neden olur. Lazer alanının büyüklüğü kuyu genişliğinin yarısından büyük olması durumunda kuyu tabanında oluşan bariyer tepesi nedeni ile (bakınız şekil 7.3) sistemde çift Coulomb merkezi oluşmaya başlar. Oluşan bu çift Coulomb merkezinden dolayı ilgilendiğimiz problem yukarıda önerilen deneme dalga fonksiyonu ile çözülemez. Bu nedenle çalışmamızda $\alpha_0 = \frac{Lw}{2}$ koşulunu sağlayan α_0 değerleri kullanılmıştır.

Şekil 7.6'da $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyu sisteminde azot ve indiyum konsantrasyonlarının değiştirilmesi ile kuyu sınırlarındaki donör safsızlık atomları ($x_i = y_i = 0, z_i = \pm Lw/2$) için bağlanma enerjisinin α_0 ' a göre değişimi incelenmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi lazer alanı arttıkça bağlanma enerjisi bir maksimuma ulaşıncaya kadar artar ve daha sonra artan α_0 değerleri için azalmaya başlar. Lazer alanı kuyunun daralmasına, buna bağlı olarak da elektronun enerjisinin artmasına neden olur. Böylece elektronun engellere sızması nedeni ile bağlanma enerjisi artan α_0 ' la azalır.

8. Sonular

Bu alıřmada, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyusunun elektronik bant yapısı ve donor safsızlık atomlarının baėlanma enerjileri zerine lazer alanının azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkileri incelenmiřtir.

alıřmamızın ilk ařamasında $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ kle yarıiletkeninin elektronik bant yapısı 4+6 bant $\vec{k}.\vec{p}$ teorisi kullanılarak hesaplandı. Yapılan hesaplar sonucunda sabit bir indiyum konsantrasyonunda, yapıdaki azot konsantrasyonunun artırılması ile yasak bant enerji aralıėı ve dielektrik sabiti azalırken, elektron etkin ktlesinin arttıėı benzer řekilde sabit bir azot konsantrasyonunda, indiyum konsantrasyonunun artırılması ile yasak bant enerji aralıėı ve elektron etkin ktlesi azalırken dielektrik sabitinin arttıėı grlmřtr. Bu da malzemenin fiziksel parametrelerinin azot ve indiyum konsantrasyonları ile arzu edilen bir řekilde ayarlanabileceėini gstermektedir. Kle $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$ yarıiletkeni iin alıřmanın ilk ařamasında elde edilen bu Hamiltonian matrisleri kullanılarak $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sisteminin iletim ve valans alt bant yapısı sonlu elemanlar yntemi (FEM) kullanılarak hesaplandı. Sonlu elemanlar yntemi ile yapılan elektronik bant yapısı hesaplamalarında global elementteki nod sayısı 5, toplam nod sayısı da 5000 olarak alındı. Bu enerji zdeėeri hesaplamalarında ok kk hata miktarlarına ($\sim 0.001 meV$) karřılık gelmektedir. $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ kuantum kuyu sisteminin iletim ve valans alt bant yapısı zerine azot ve indiyum konsantrasyonlarının etkisi incelendi. Hem azot hem de indiyum konsantrasyonunun artırılması sonucunda kuyu ve bariyer malzemeleri arasındaki bant sreksizliėinin bymesi tařıyıcıların daha iyi kuřatılmasına neden olduėu grlmřtr. Kuřatma potansiyelindeki bu artıř iletim ve valans bandındaki alt bant enerji seviyelerinin artmasına neden olmuřtur. Bu durum yapıdaki azot ve indiyum konsantrasyonlarının deėiřtirilmesi ile amaca uygun alt bant enerji seviyelerini ayarlayarak istenilen blgede alıřabilen opto-elektronik aygıt yapılmasına olanak saėlamaktadır.

alıřmanın ikinci kısmında, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyu sistemindeki donor safsızlık atomlarının baėlanma enerjisi varyasyonel olarak hesaplanmıřtır. Sonular kuyu geniřliėi, azot ve indiyum konsantrasyonlarının bir fonksiyonu olarak elde edilmiřtir. Kuyu geniřliėi artıka, baėlanma enerjisi bir

maksimuma ulařıncaya kadar artar ve sonra azalmaya bařlar. Baęlanma enerjisinin maksimum olduęu kuyu geniřlięi deęerleri iin sistem yarı-iki boyutlu karaktere sahiptir ve elektron ile donör safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılıęı fazladır. ok büyük kuyu geniřlięi deęerlerinde ise, büyütme doęrultusundaki kuřatma azalır ve donör safsızlık atomunun baęlanma enerjisi üç-boyutlu sistemdeki deęerine yaklařır. Bu nedenle geniř kuyularda elektron ve donör safsızlık atomunun aynı düzlemde bulunma olasılıęı ok küçüktür. Ayrıca ok küçük kuyu geniřlięi deęerlerinde elektron ok enerjik olduęundan potansiyel engellerine sızmaları artar ve sistem ok büyük kuyu geniřlięi deęerlerinde olduęu gibi yeniden üç-boyutlu karaktere sahip olur. Bundan dolayı da ok küçük kuyu geniřlięi deęerleri iin baęlanma enerjisi azalacaktır. Azot konsantrasyonunun artması sistemdeki kuřatma potansiyelini büyüteceęinden, elektron ile donör safsızlık atomu arasındaki Coulombic etkileřimi artıracak ve bu nedenle donör safsızlık atomunun baęlanma enerjisi artacaktır. İndiyum konsantrasyonundaki artış ise kuřatmayı artırırken elektronun etkin kütesini azaltmaktadır. Yüksek indiyum konsantrasyonlarında elektron daha enerjik olduęundan engellere sızması fazladır. Bu sonuçla da safsızlık baęlanma enerjisi indiyum konsantrasyonunun artması ile azalmaktadır.

alıřmamızın son ařamasında, yoęun lazer alanı altındaki $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y} / GaAs$ tek kuantum kuyu sisteminin alt bant enerjileri ve donör safsızlık atomlarının baęlanma enerjisi varyasyonel olarak hesaplanmıřtır. Sonuçlar kuyu geniřlięi, azot ve indiyum konsantrasyonlarının bir fonksiyonu olarak elde edilmiřtir. Yoęun lazer alanının büyüklüęünün artması ile baęlı durumların arttıęı görülmüřtür. Bu baęlı durumların artması bantlar arası geiřler iin iyi bir rehber olmasının yanı sıra yarıiletken kuantum kuyu potansiyelinin tek kuyudan ift kuyuya geiřini de göstermektedir. Lazer alanının büyüklüęünün artması ile enerji seviyelerinin ilk etapta maviye kaydıęı daha sonra ise birleřtikleri görülmüřtür. Bu özellik optiksel pompolama lazer projelerinde alıřan bir kuantum kuyu lazer sistemindeki nüfus tersinmesinin kontrolü iin temel olarak alınabilir. Uyarılmıř durumlar arasındaki yakınlık nüfus tersinme oranını arařtırmak iin hesaplanabilir.

Lazer alanının büyümesi ile donör safsızlık atomlarının baęlanma enerjisinin azaldıęı görülmüřtür. Baęlanma enerjisindeki bu azalıřın sebebi lazer alanının kuřatma potansiyeli üzerindeki etkisidir. Lazer alanının artması ile kuřatma potansiyelinde, lazer alanının büyüklüęü kuyu geniřlięinin yarısına eřit olana kadar kuyu tabanında bir

daralmaya neden olur. Bu daralmanın etkisi ile baęlı durum enerji seviyeleri daha yüksek enerji seviyelerine kayar. Bu durumda elektron çok enerjik olduęu için engellere sızmalar meydana gelir. Böylece elektron ve donör safsızlık atomu birbirini görme olasılığı azaldığından bağlanma enerjisinde bir azalmaya neden olur.

Bu çalışmada kullanılan yöntem, $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ tek kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özellikleri azot ve indiyum konsantrasyonları ile deęişimlerini incelememize olanak sağlar. Bu fiziksel nicelikler yeni yarıiletken mikroyapıların uygulanmasında ve açıklanmasında anahtar parametrelerdir.

KAYNAKLAR

1. R. Dingle, W. Wigman, and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* 33, (1974) 827.
2. D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Weigman, T. H. Wood, and C. A. Burrus, *Phys. Rev. B* 32, (1985) 1043.
3. G. D. Sanders and Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* 32, (1985) 4282.
4. A. M. Elabsy, *J. Phys. Condes. Matter* 6, (1994) 10025.
5. K. I. Kolokolov, S. D. Beneslavski, N. Y. Minina, A. M. Savin, *Phys. Rev. B* 63, (2001) 195308.
6. B. Gil, P. Lefebvre, P. Bonnel, H. Mathieu, C. Deparis, J. Massies, G. Neu, Y. Chen, *Phys. Rev. B* 47, (1993) 1954.
7. H. J. Ehrenreich, *J. Appl. Phys.* 32, (1961) 2155.
8. D. E. Aspens, *Phys. Rev. B* 14, (1976) 5331.
9. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 58, (1985) R1.
10. B. Welker, M. Cardona, C. K. Kim, S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* 12 (1975) 5729; A. Jayaraman, *Rev. Mod. Phys.* 55, (1983) 65.
11. M. Weyers, M. Sato, and H. Ando, *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, (1992) L853.
12. H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlow, and M. Burns, *J. Appl. Phys.* 76, (1994) 1363.
13. B. Monomar, *Phys. Rev. B*, 10 (1974) 676.
14. K. Osamura, S. Naka and Y. Murakama, *J. Appl. Phys.*, 46 (1975) 3432.
15. I. Akasaki, H. Amano, Y. Koide, K. Hiramatsu and N. Sawaki, *J. Cryst. Growth*, **98**, (1989) 209.
16. S. Nakamura, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **30**, (1991) L1705.
17. M. Kondow, K. Uomi, A. Niwa, T. Kitatani, S. Watahiki and Y. Yazawa, , *Jpn. J. Appl. Phys.*, **35**, (1996) 1273.
18. M. Kondow, T. Kitatani, S. Nakatsuka, M. Larson, K. Nakahara, Y. Yazawa and M. Okai, , *IEEE J. Select. Topics Quantum Electron.*, **3**, (1997) 719.
19. M.A. Haase, J. Qui, J.M. DePuydt and H. Cheng, Blue-green laser-diodes, *Appl. Phys. Lett.*, **59**, (1991) 1272.
20. J.J. Hsieh and C.C. Shan, *Appl. Phys. Lett.*, **30**, (1977) 429.
21. I. A. Buyanova and W. M. Chen, “Physics and Applications of Dilute Nitrides” New York London, Taylor&Francis, (2004), 309.

22. J. Tulkki, “Grade course on Quantum Semiconductor Structures, Helsinki University of Technology, Laboratory of Computational Engineering, (1996–2001).
23. A. Lindsay and E. P. O’Reilly, *Solid State Comms.* 112, (1999) 443.
24. T. Kitatani, M. Kondow, T. Kikawa, Y. Yazawa, M. Okai and K. Uomi, *Jpn. J. Appl. Phys.* 38 (1999) 5003.
25. P. Krispin, S.G. Spruytte, J.S. Harris and K.H. Ploog, *J. Appl. Phys.* 88, (2000) 4153.
26. I.A. Buyanova, G. Pozina, P.N. Hai, W.M. Chen, H.P. Xin HP and C.W. Tu, *Phys. Rev. B* 63 (2001) 033303.
27. B.Q. Sun, D.S. Jiang, X.D. Luo, Z.Y. Xu, Z. Pan, L.H. Li and R.H. Wu, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000) 2862.
28. P.J. Klar, H. Gruning, W. Heimbrod, J. Koch, W. Stolz, P.M.A. Vicente, A.M. Kamal Saadi, A. Lindsay and E.P. O’Reilly, *Phys. Stat. Sol. (b)* 223 (2001) 163.
29. S. Tomic, E. P. O’Reilly, R. Fehse, S. J. Sweeney, A. R. Adams, A. D. Andreev, S. A. Choulis, T. J. C. Hoesa, and H. Riechert, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 9 (2003) 1228.
30. S. T. Ng, W. J. Fan, Y. X. Dang, S. F. Yoon, *Phys. Rev. B.* 72, (2005) 115341.
31. I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* 89, (2001) 5815.
32. J. E. Pask, B. M. Klein, P. A. Sterne, C. Y. Fong, *Computer Physics Communications* 135, (2001) 1.
33. Young W. Kwon and Hyochoong Bang, “The finite element method using matlab” CRC press (2000).
34. David V. Hutton, “Fundamentals of finite element analysis” Mc Graw Hill press (2004).
35. I. V. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* 89 (2001) 5815.
36. S. Strite, D. Chandrasekhar, D. J. Smith, J. Sariel, H. Chan, N. Teraguchi, H. Morkoc, *J. Crystal. Growth* 127 (1993) 204.
37. A. Tadjer, B. Abbar, M. Rekzi, H. Aourag, M. Certier, *J. Phys. Chem. Solids* 60 (1999) 419.
38. S. H. Wei, A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 2719.
39. A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* 82 (1997) 2833.
40. K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, *Phys. Rev.* 53 (1996) 16310.
41. S. H. Park, S. L. Chuang, *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 353.
42. A. T. Meney, E. P. O’Reilly, A. R. Adams, *Semicond. Sci. Technol.* 11 (1996) 897.

43. S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand, R. A. Abram, *Semicond. Sci. Technol.* 14 (1999) 23.
44. W. W. Chow, A. F. Wright, J. S. Nelson, *Appl. Phys. Lett.* 68 (1996) 296.
45. V. I. Gavrilenko, R. Q. Wu, *Phys. Rev. B* 61 (2000) 2632.
46. E. H. Li, *Physica E* 5 (2000) 215.
47. R. Goldhahn, J. Scheiner, S. Shokhovets, T. Frey, U. Kohler, D. J. As, K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000) 291.
48. M. Kondow, K. Uomi, K. Hosomi, T. Mozume, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* 33 (1992) L1056.
49. T. Yang, S. Nakajima, S. Sakai, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* 36 (1997) L230.
50. See, eg: K. Goser, P. Glosekotter, and J. Deinstuhl, “Nanoelectronics and Nanosystems, (Springer, New York, 2004)
51. C. Weisbuch and B. Vinter, “Quantum Semiconductor Structures” (Academic Press, Orsay, France, 1991)
52. V. V. Mitin, V. A. Kohclap, and M. A. Stroscio, “Quantum Heterostructures” (Cambridge Univ. Press, New York, 1999)
53. S. D. Ganichev and W. Prettl, “Intense Terahertz Excitation of Semiconductors” (Oxford Univ. Press, Oxford, 2006)
54. A. P. Jauho and K. Johnsen, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 4576; W. Xu, *Europhys. Lett.* 40 (1997) 411; J. Kono, M. Y. Su, T. Inoshita, T. Noda, M. S. Sherwin, S. J. Allen Jr., and H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 1758; H. Nakano, H. Kubo, N. Mori, C. Hamaguchi, and L. Eaves, *Physica E* 7 (2000) 555; N. Mori, T. Takahashi, H. Kubo, C. Hamaguchi, L. Eaves, C. T. Foxon, A. Patanc, and M. Henini, *Physica B* 314 (2002) 431.
55. 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 (2004) 035307.
56. 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 (2008) 125038.
57. R. G. Mani, J. H. Smet, K. Von Klitzing, V. Narayanamurti, W. B. Johnson, and V. Umansky, *Nature* 420, (2002) 646; J. Inarra and G. Placro, *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005) 016806.
58. L. C. M. Miranda, *Sol. State Communic.* 45 (1983) 783; Y. Mizumoto, Y. Kaymuna, A. Srivastava, J. Kono, and A. H. Chin, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 045216.

- 59.** O. A. C. Nunes, *J. Appl. Phys.* 58 (1985) 2102; 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 (1998) 457; S. Hughes and D. S. Citrin, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 4228; T. Y. Zhang and W. Zhao, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 245337.
- 60.** N. G. Asmar, A. G. Markelz, E. G. Gwinn, J. Cerne, M. S. Sherwin, K. L. Chapman, P. E. Hopkins, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 18041.
- 61.** H. Hsu and L. E. Reichl, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 115406.
- 62.** O. O. Diniz Neto and F. Qu, *Superlatt. Microstruct.* 35 (2004) 1.
- 63.** W. Xu, *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006) 171107.
- 64.** H. Sari, E. Kasapoglu, I. Somken, and M. Gunes, *Phys. Lett. A* 319 (2003) 211; E. Kasapoglu, H. Sari, U. Yesilgul, and I. Sokmen, *J. Phys.: Condens. Matter* 18 (2006) 6263; N. R. Das and S. Sen *Phys. B* 403 (2008) 3746.
- 65.** Q. Fanyao, A. L. A. Fonseca, and O. A. C. Nunes, *Phys. Stat. Sol. (b)* 197 (2001) 4187.
- 66.** Q. Fanyao and P. C. Morais, *J. Phys. Soc. Japon* 67 (1998) 513.
- 67.** Q. Fanyao, A. L. A. Fonseca, and O. A. C. Nunes, *Superlatt. Microstruct.* 23 (1998) 1005.
- 68.** E. C. Niculesco, L. M. Burileanu, A. Radu, *Superlatt. Microstruct.* 44 (2008) 173.
- 69.** A. Radu, E. C. Niculesco, and M. Cristea, *J. Optoelectron Adv. Mater.* 10 (2008) 2555.
- 70.** H. Sari, E. Kasapoglu, I. Sökmen, and N. Balkan, *Semicond. Sci. Technol.* 18 (2003) 470.
- 71.** E. C. Valadares, *Phys. Rev. B* 41 (1990) 1282; C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001) 4187.
- 72.** E. Gerek and L. C. M. Miranda, *Appl. Phys. Lett.* 44 (1984) 837.
- 73.** F. Ehlitzky, *Can. J. Phys.* 63 (1985) 907; *Phys. Lett. A* 126 (1988) 524.
- 74.** H. A. Kramers, "Collected Scientific Papers" (Amsterdam, Nort-Holland, 1956), p. 866.
- 75.** W. C. Hennenberg, *Phys. Rev. Lett.* 21 (1968) 838.
- 76.** P. W. Milonni and J. R. Ackerhalt, *Phys. Rev. A* 39 (1989) 1139.
- 77.** 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 (2008) 113112.
- 78.** M. Gavrilla and J. Z. Kaminski, *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984) 613.
- 79.** M. Gavrilla, "In Atoms in Intense Laser Fileds" (Academic press, New York 1992)

- 80.** M. Hetterich, M. D. Dowson, A. Yu. Egorov, D. Bernklau, H. Hettirich, Appl. Phys. Lett. 76 (2000) 1030.

EK-1
KANE MODELİ İÇİN ELDE EDİLEN HAMILTONİAN MATRİS
ELEMENLARININ BULUNMASI

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ teorisi pertürbasyon temelli bir teori idi ve teorideki yöntem, incelenen sistemin Hamiltoniyeninin ilgilenen bantlardaki fonksiyonlar bazındaki matris temsilini elde etmek idi. Bu aşamadan sonra elde edilen matris temsilinde özdeğer ve özvektörler bulunuyordu. Kane modeli için Hamiltonianın matris elemanları tablo I deki baz fonksiyonları kullanılarak aşağıdaki şekilde elde edilir.

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

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

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

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

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

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

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

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

biçimindedir.

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,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{16} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_{0} + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{16} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle \rangle + \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} | \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_{0}$$

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

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

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

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

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

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

$$H_{18} = \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_{0} + \langle iS \uparrow | \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle$$

$$H_{18} = \langle iS \uparrow | \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} | -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle \rangle + \underbrace{\langle iS \uparrow | \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} | \sqrt{\frac{1}{3}} | Z \downarrow \rangle \rangle}_{0}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{31} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_{0} + \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X + iY) \uparrow \left| \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle \right.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{45} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| H(k=0) \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

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

$$H_{45} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{45} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X+iY) \downarrow | \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle + \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \uparrow | \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_0$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{52} = \underbrace{\langle iS \downarrow | H(k=0) | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle}_0 + \langle iS \downarrow | W(k) | - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | (X+iY) \downarrow \rangle \rangle$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{65} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \rangle}_{0} + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{65} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle (X - iY \uparrow | \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle}_{0} + \left\langle -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle Z \downarrow | \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \rangle \right\rangle$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_{75} = \frac{1}{\sqrt{2}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \downarrow | P_x | S \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle Y \downarrow | P_y | S \downarrow \rangle$$

$$H_{75} = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_x P + (i) \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar k_y P$$

$$H_{75} = P \hbar k_+ \text{ elde edilir.}$$

$$H_{76} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \middle| H(k) \middle| -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{77} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \middle| H(k) \middle| \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \right\rangle = -\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$H_{78} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (X - iY \downarrow) \middle| H(k) \middle| -\frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{81} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \middle| H(k) \middle| iS \uparrow \rangle \right\rangle = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \middle| H(k=0) + W(k) \middle| iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{81} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \middle| H(k=0) \middle| iS \uparrow \rangle \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \middle| W(k) \middle| iS \uparrow \rangle \right\rangle$$

$$H_{81} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{81} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle$$

$$H_{81} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle + \underbrace{\left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \uparrow \right\rangle}_0$$

$$H_{81} = -\frac{1}{\sqrt{3}} (i) \frac{\hbar k_x}{m_0} \langle X \uparrow | P_x | S \uparrow \rangle + -\frac{1}{\sqrt{3}} (i) \frac{\hbar k_y}{m_0} \langle Y \uparrow | P_y | S \uparrow \rangle$$

$$H_{81} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \hbar k_x P - \frac{1}{\sqrt{3}} (i) \hbar k_y P$$

$$H_{81} = -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_+ \text{ elde edilir.}$$

$$H_{82} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| -\sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |X + iY \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{83} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} |X + iY \uparrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{84} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{3}} |X + iY \downarrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{85} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k) \right| iS \downarrow \right\rangle = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k=0) + W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{85} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| H(k=0) \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| W(k) \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{85} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{85} = \underbrace{\left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY \uparrow) \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle}_0 + \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow \left| \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m_0} \right| iS \downarrow \right\rangle$$

$$H_{85} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar k_z}{m_0} (i) \langle Z \downarrow | P_z | S \downarrow \rangle$$

$$H_{85} = \frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z \text{ elde edilir.}$$

$$H_{86} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{6}} | (X - iY) \uparrow \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{87} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \left| H(k) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - iY) \downarrow \rangle \right\rangle = 0$$

$$H_{88} = \left\langle -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle (X - iY) \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle Z \downarrow | \left| H(k) \right| -\frac{1}{\sqrt{3}} | (X - iY) \uparrow \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | Z \downarrow \rangle \right\rangle = -\varepsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

şeklinde elde edilmiş olur.

EK-2

POLİNOM İNTERPOLASYONU VE LAGRANGE POLİNOMLARININ
ELDE EDİLMESİ

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,

$$P_n(z) = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + \dots + a_n z_n \quad (1)$$

polinomu vardır ($i = 1, 2, \dots, n$ için $P_n(z(i)) = f(z(i))$). $P_n(z)$ polinomu elde edilip bir z noktasındaki $f(z)$ değerinin yerine $P_n(z)$ alınır, bilinmeyen $f(z)$ değeri yaklaşık $f(z) \approx \widetilde{f(z)} = P_n(z)$ 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

$$P_n(z) = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + \dots + a_n z_n \quad (3)$$

polinomu belirlemek için

$$P_n(z(i)) = f(z(i)) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4)$$

yani,

$$\begin{cases} a_0 + a_1 z_1(1) + a_2 z_2(1) + \dots + a_n z_n(1) = f(z(1)) \\ a_0 + a_1 z_1(2) + a_2 z_2(2) + \dots + a_n z_n(2) = f(z(2)) \\ \vdots \\ a_0 + a_1 z_1(n+1) + a_2 z_2(n+1) + \dots + a_n z_n(n+1) = f(z(n+1)) \end{cases} \quad (5)$$

denklem sisteminden $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ katsayılarının belirlenmesi gerekir. Bu lineer denklem sistemi çözümlenerek 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 $P_n(z)$ polinomu bulunmak isteniyor. $P_n(z)$ polinomu, herbiri n. dereceden bir polinom olan $L_1(z), L_2(z), \dots, L_n(z)$ polinomları cinsinden,

$$P_n(z) = L_1(z) \cdot f(z_1) + L_2(z) \cdot f(z_2) + \dots + L_n(z) \cdot f(z_n)$$

olarak yazılsın. $P_n(z)$ polinomunun, $(z_1, f(z_1)), (z_2, f(z_2)), \dots, (z_n, f(z_n))$ noktalarından geçmesi için,

$$P_n(z_1) = f(z_1) \Rightarrow L_1(z_1) = 1, L_2(z_1) = 0, L_3(z_1) = 0, \dots, L_n(z_1) = 0$$

$$P_n(z_2) = f(z_2) \Rightarrow L_1(z_2) = 0, L_2(z_2) = 1, L_3(z_2) = 0, \dots, L_n(z_2) = 0$$

$$P_n(z_3) = f(z_3) \Rightarrow L_1(z_3) = 0, L_2(z_3) = 0, L_3(z_3) = 1, L_4(z_3) = 0, \dots, L_n(z_3) = 0$$

...

$$P_n(z_n) = f(z_n) \Rightarrow L_1(z_n) = 0, L_2(z_n) = 0, L_3(z_n) = 0, \dots, L_{n-1}(z_n) = 0, L_n(z_n) = 1$$

yani,

$$L_j(z_i) \begin{cases} 1 & , i=j \\ 0 & , i \neq j \end{cases}$$

olmalı. Buna göre, $L_1(z) = ?$, $L_2(z) = ?$, \dots , $L_n(z) = ?$

$L_1(z)$ 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,

$$P_n(z) = \sum_{i=1}^n L_i(z) f(z_i) = \sum_{i=1}^n \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} \right) f(z_i)$$

elde edilir. Bu formül Lagrange formülü olarak bilinir.

4.2. Bir Boyutta Yüksek Mertebe Bazlar

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,

$$P_1(z(i)) = a_0 + a_1 z_1(i) \quad (9)$$

dir.

$$P_1(z(i)) = f(z(i)), \quad i = 1, 2 \quad (10)$$

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,

$$P_1(z) = \frac{z-z(2)}{z(1)-z(2)} \cdot f(z(1)) + \frac{z-z(1)}{z(2)-z(1)} \cdot f(z(2)) \quad (16)$$

biçiminde elde edilir. Dikkat edilirse $P_1(z)$ 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,

$$P_1(z) = L_1(z) \cdot f(z(1)) + L_2(z) \cdot f(z(2)) \quad (19)$$

olarak yazılabilir. $L_1(z), L_2(z)$ fonksiyonları için

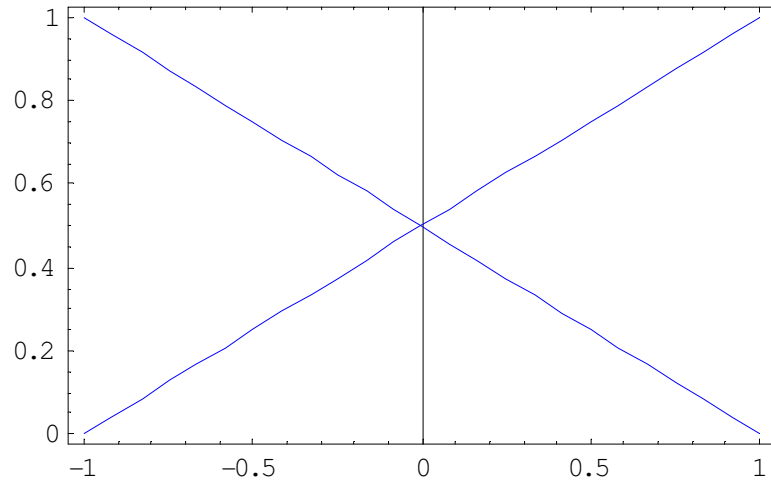
$$L_1(z(1)) = 1, L_1(z(2)) = 0 \quad (20)$$

$$L_2(z(1)) = 0, L_2(z(2)) = 1 \quad (21)$$

dır. Biçim fonksiyonları ise,

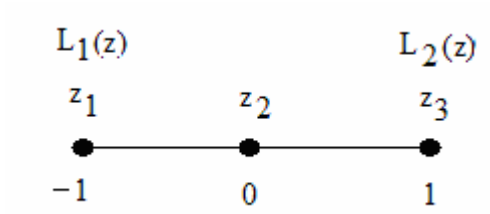
$$\begin{aligned} N_1(z) &= L_1(z) \\ N_2(z) &= L_2(z) \end{aligned} \quad (22)$$

dir.



Şekil 1. Uzayın bire bölünmesi ile (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 2. 1 boyutta 3 nodlu bir global element

Şekil fonksiyonlarını bulacak olursak,

$$N_1(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_2)(z - z_3)}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)} = \frac{1}{2}(z)(z - 1) \quad (23)$$

elde edilir. $N_1(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_1(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_1(z) = 2L_1(z)\left(L_1(z) - \frac{1}{2}\right) \quad (24)$$

olarak elde edilir.

$$N_2(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_3)}{(z_2 - z_1)(z_2 - z_3)} = -(z + 1)(z - 1) \quad (25)$$

$N_2(z)$ şekil fonksiyonu hem $L_1(z)$ hem de $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_2(z) = 4L_1(z)L_2(z) \quad (26)$$

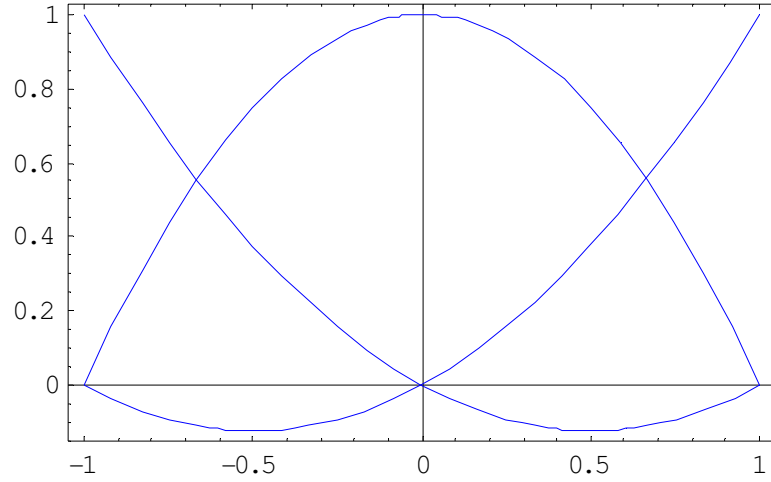
olarak elde edilir.

$$N_3(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_2)}{(z_3 - z_1)(z_3 - z_2)} = \frac{1}{2}(z)(z + 1) \quad (27)$$

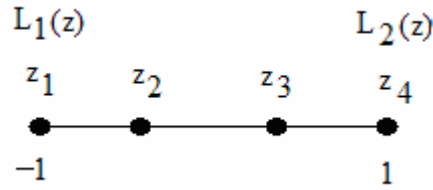
$N_3(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_3(z) = 2L_2(z)\left(L_2(z) - \frac{1}{2}\right) \quad (28)$$

olarak elde edilir.



Şekil 3. Uzayın ikiye bölünmesi ile (G.E.N.S.=3) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu



Şekil 4. 1 boyutta 4 nodlu bir global element

Şekil fonksiyonlarını bulacak olursak,

$$N_1(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_2)(z - z_3)(z - z_4)}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)} \quad (29)$$

elde edilir. $N_1(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_1(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_1(z) = \frac{9}{2} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{3} \right) \left(L_1(z) - \frac{2}{3} \right) \quad (30)$$

olarak elde edilir.

$$N_2(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_3)(z - z_4)}{(z_2 - z_1)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)} \quad (31)$$

$N_2(z)$ şekil fonksiyonu hem $L_1(z)$ hem de $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_2(z) = \frac{27}{2} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{3} \right) L_2(z) \quad (32)$$

olarak elde edilir.

$$N_3(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_2)(z - z_4)}{(z_3 - z_1)(z_3 - z_2)(z_3 - z_4)} \quad (33)$$

$N_3(z)$ şekil fonksiyonu hem $L_1(z)$ hem de $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_1(z) = \frac{27}{2} L_1(z) \left(L_2(z) - \frac{1}{3} \right) L_2(z) \quad (34)$$

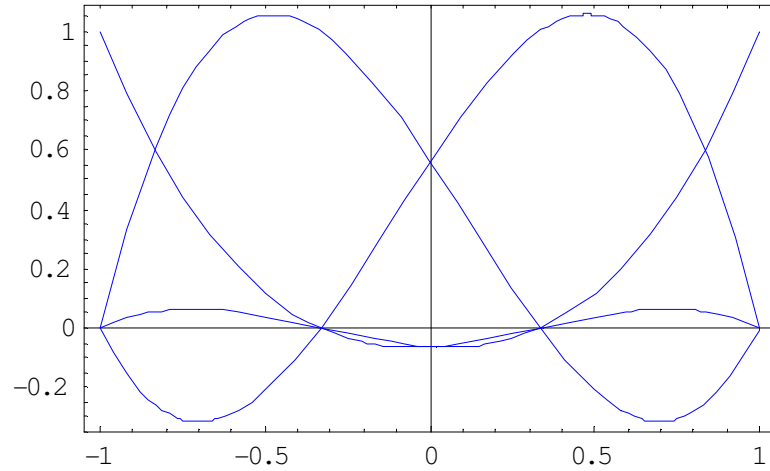
olarak elde edilir.

$$N_4(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \frac{(z - z_j)}{(z_i - z_j)} = \frac{(z - z_1)(z - z_2)(z - z_3)}{(z_4 - z_1)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3)} \quad (35)$$

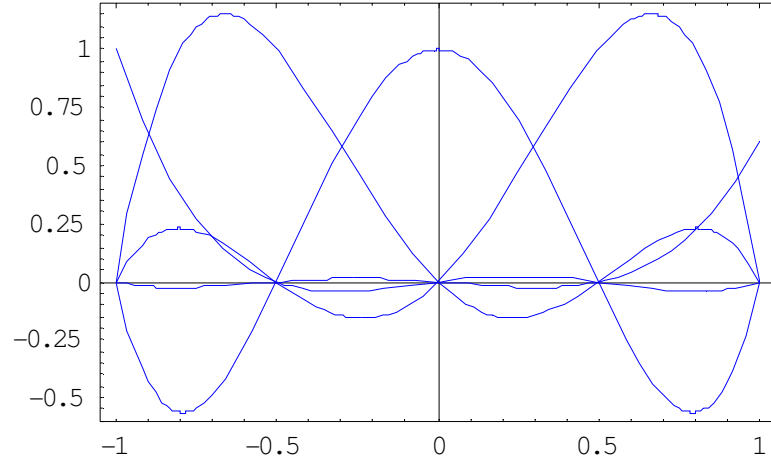
$N_4(z)$ şekil fonksiyonu sadece $L_2(z)$ alan fonksiyonuna bağlı olacağından,

$$N_4(z) = \frac{9}{2} L_2(z) \left(L_2(z) - \frac{1}{3} \right) \left(L_2(z) - \frac{2}{3} \right) \quad (36)$$

olarak elde edilir.



Şekil 5 . Uzayın üç bölünmesi ile (G.E.N.S.=4) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu



Şekil 6. Uzayın dörde bölünmesi ile (G.E.N.S.=5) bu uzayda elde edilen baz fonksiyonu

$$\begin{aligned}
 N_1(z) &= \frac{64}{6} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{4}\right) \left(L_1(z) - \frac{2}{4}\right) \left(L_1(z) - \frac{3}{4}\right) \\
 N_2(z) &= \frac{64.4}{6} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{4}\right) \left(L_1(z) - \frac{2}{4}\right) L_2(z) \\
 N_3(z) &= \frac{64.4}{6} L_1(z) \left(L_1(z) - \frac{1}{4}\right) \left(L_2(z) - \frac{1}{4}\right) L_2(z) \\
 N_4(z) &= \frac{64.4}{6} L_1(z) \left(L_2(z) - \frac{1}{4}\right) \left(L_2(z) - \frac{2}{4}\right) L_2(z) \\
 N_5(z) &= \frac{64}{6} L_2(z) \left(L_2(z) - \frac{1}{4}\right) \left(L_2(z) - \frac{2}{4}\right) \left(L_2(z) - \frac{3}{4}\right)
 \end{aligned} \tag{37}$$

şeklinde elde edilmiş olur.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel bilgiler

Adı Soyadı	Fatih UNGAN
Doğum Yeri ve Tarihi	Ankara, 12/06/1978
Medeni Hali	Evli
Yabancı Dil	İngilizce
İletişim Adresi	Cumhuriyet Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 58140-Sivas/Türkiye
E-posta Adresi	fungan@cumhuriyet.edu.tr

Eğitim Durumu

İlkokul	İstanbul Maltepe Orhan Gazi İlköğretim Okulu (1984–1986) İstanbul Tuzla Evliya Çelebi İlkokul (1986–1989)
Ortaokul	İstanbul Tuzla Avni Yukarı Uç İlköğretim Okulu (1989–1991) İstanbul Kaynarca Şevket Sabancı Ortaokul (1991–1992)
Lise	İstanbul Kaynarca Alpaslan Lisesi (1992–1993) Sivas Kongre Lisesi (1993–1995)
Lisans	Karadeniz Teknik Üniversitesi, (1996–2000)
Yüksek Lisans	C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı (2001–2004). Tez Konusu: Simetrik Katkılı Çift Kuantum Kuyusunun potansiyel Profilleri ve Altbant Yapısı
Doktora	C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı (2006–2010). Tez Konusu: Yoğun Lazer Alanı Altında GaInNAs/GaAs Kuantum Kuyularındaki Donor Safsızlık Atomlarının Bağlanma Enerjileri

Akademik Görevler

Cumhuriyet Üniversitesi Araştırma görevlisi, 2001-

Katıldığı Bilimsel Toplantılar

- 1- “n-katlı çift simetrik $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ kuantum kuyularının elektronik özellikleri üzerine engel kalınlığının etkisi” F. Urgan, E. Öztürk, Y. Ergün, İ. Sökmen, 10. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, 14 Kasım 2003 Hacettepe Üniversitesi, ANKARA.
- 2- “Subband structure and band bending in asymmetric modulation-doped $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ double quantum wells” F. Urgan, Y. Ergün, İ. Sökmen, 14. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, 03 Kasım 2006, ODTÜ, ANKARA
- 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- “ Finite element analysis of conduction band structure and intersubband transitions of square quantum well under electric field and stress” Nano TR5 Nanoscience and Nanotechnology 2009, Anadolu Üniversitesi, ESKİŞEHİR
- 7- “Diamagnetic susceptibility of a donor in $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ quantum well under the magnetic field” MP805 Cost Meeting İstanbul Üniversitesi, İSTANBUL
- 8- “Investigation of the band structure of $In_xGa_{1-x}N_yAs_{1-y}$ single quantum well with 10-band k.p model” E-MRS 2010 Spring Meeting, Strasbourg, FRANSA
- 9- “Effect of the intense laser field on the exciton binding energy in $Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs$ quantum wells” E-MRS 2010 Spring Meeting, Strasbourg, FRANSA

Yayınlar

- 1- F. Urgan, E. Öztürk, Y. Ergün, İ. Sökmen, “Subband structure and band bending in symmetric modulation-doped double quantum wells” *Eur. Phys. J. Appl. Physics*, 29, 1 (2005)
- 2- F. Urgan, E. Öztürk, Y. Ergün, İ. Sökmen, “The variation of electronic properties with the doping concentration of modulation-doped $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ double quantum wells” *Superlattices and Microstructures* 41, (2007)
- 3- F. Urgan, E. Kasapoglu, H. Sarı, İ. Sökmen, “Electronic structure and band bending of modulation-doped $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ symmetric and asymmetric double quantum wells under an applied electric field” *Surface Review and Letters* 16, 105 (2009)
- 4- E. Kasapoglu, F. Urgan, H. Sarı, İ. Sökmen, “Binding energies of donor impurities in modulation-doped $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ double quantum wells under an electric field” *Superlattices and Microstructures* 45, 618 (2009)
- 5- F. Urgan, E. Kasapoglu, H. Sarı, İ. Sökmen, “Inter-sub-band transitions and binding energies of donor impurities in a modulation-doped quantum well in the presence of electric field” *Superlattices and Microstructures* 46, 864 (2009)
- 6- E. Kasapoglu, F. Urgan, H. Sarı, İ. Sökmen, “The diamagnetic susceptibilities of donors in quantum wells with anisotropic effective mass” *Superlattices and Microstructures* 46, 817 (2009)
- 7- E. Kasapoglu, F. Urgan, H. Sarı, İ. Sökmen, “The hydrostatic pressure and temperature effects on donor impurities in cylindrical wire under the magnetic field” *Physica E* 42, 1623 (2010)
- 8- 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, 2980 (2010)

Projeler

- 1- “Simetrik katkılı çift kuantum kuyusunun potansiyel profilleri ve altbant yapısı” Cumhuriyet Araştırma Fon Saymanlığı (F-138) Yardımcı Araştırmacı, 2004.
- 2- “Yoğun Lazer Alanı Altında GaInNAs/GaAs Kuantum Kuyularındaki Donor Safsızlık Atomlarının Bağlanma Enerjileri” Cumhuriyet Araştırma Fon Saymanlığı (F-236) Yardımcı Araştırmacı, 2010.