

HİDROSTATİK BASINÇ ALTINDA DÜŞÜK BOYUTLU
YARIİLETKEN SİSTEMLERİN ELEKTRONİK VE OPTİK
ÖZELLİKLERİ

METİN GÜNEŞ

DOKTORA TEZİ
KATIHAL FİZİĞİ ANABİLİM DALI
2009

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HİDROSTATİK BASINÇ ALTINDA DÜŞÜK BOYUTLU
YARIİLETKEN SİSTEMLERİN ELEKTRONİK VE OPTİK
ÖZELLİKLERİ

METİN GÜNEŞ

DOKTORA TEZİ

KATIHAL FİZİĞİ ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI
PROF.DR. HÜSEYİN SARI

SİVAS
2009

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. İsmail SÖKMEN
Üye	Prof.Dr. Yüksel ERGÜN
Üye	Prof.Dr. Sezai ELAGÖZ
Üye	Doç.Dr. Esin KASAPOĞLU
Üye (Danışman)	Prof.Dr. Hüseyin SARI

ONAY

Bu tez çalışması, / /200 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 00.00.2008 tarihli ve 000 sayılı toplantısında kabul edilen Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzu adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

Çalışmam sırasında sevgi ve desteğini hiçbir zaman esirgemeyen sevgili eşim
E.Gülşen'e ve aileme...

ÖZET

HİDROSTATİK BASINÇ ALTINDA DÜŞÜK BOYUTLU YARIİLETKEN SİSTEMLERİN ELEKTRONİK VE OPTİK ÖZELLİKLERİ

Metin GÜNEŞ

Doktora Tezi, Katıhal Fiziği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2009, 221 sayfa

Bu çalışmanın ilk aşamasında, külçe yarıiletkenler için **k.p** teorisi ve zorlanmanın külçe yarıiletkenin bant yapısına etkisi hakkında genel bilgi verilmiştir. İkinci aşamasında, yarıiletken kuantum kuyularının bant yapısı çoklu bant etkin kütle yaklaşımı (**k.p** teorisi) ile tanımlanarak, çiftlenimli ve çiftlenimsiz bantların sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile nasıl çözüleceği üzerinde durulmuştur. Sonlu elemanlar yöntemi ile $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandı (çiftlenimsiz bant) yapısı baskı, elektrik alan ve kuyu genişliğine bağlı olarak elde edilmiş ve bu değişkenlerin bant içi geçişlerdeki etkileri incelenmiştir. Üçüncü aşamasında, $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyu sisteminin valans bandı yapısı 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonianı (spin yörünge etkileşme bandını içeren) ve 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı (spin yörünge etkileşme bandını içermeyen) kullanılarak tanımlanmıştır. Çiftlenimli bantlar için sonlu elemanlar yöntemi ile spin yörünge bandının, elektrik alanın, kuyu boyutlarının ve beş farklı doğrultuda uygulanan baskının valans bandındaki dejenere alt bantların k_t 'ye göre değişimi üzerindeki etkisi araştırıldı. Son aşamasında ise, $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyu sisteminin ekzitonik yapısı 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı kullanılarak tanımlanmıştır. Bu tanımlama ile ekzitonik yapının, ekziton bağlanma enerjisinin ve ekzitonik soğurmanın kuyu genişliğine, elektrik alana ve beş farklı doğrultuda uygulanan baskıya bağlı değişimi, çoklu bant etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde sonlu elemanlar yönteminin ve varyasyonel çözüm tekniğinin birlikte kullanılmasıyla incelenmiştir.

Bu çalışma sonucunda; elektrik alanın, kuyu genişliğinin, baskı doğrultusunun ([100], [001], [110], [111] ve [hyd]), baskının büyüklüğünün ve baskının uygulama yönünün (sıkıştırma veya gerilme biçiminde) değiştirilmesi ile $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özelliklerinin kullanım amacına uygun bir biçimde ayarlanabileceği görülmüştür. Bu tezde kullanılan yöntem ile, baskı altında III-V yarıiletken bileşiklerinden oluşturulmuş kuantum kuyu sistemlerinin elektronik ve optik özelliklerinin daha hassas tanımlanma olanağı sağlanmıştır. Buradaki sonuçların Raman ve fotoluminensans deneylerinin sonuçları ile karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülebilir. Bu çalışmada sözü edilen dış parametrelerin değiştirilmesi ile soğurma piklerinin genliği ve pozisyonunun değiştirilebildiği görülmüştür. Dolayısıyla bu çalışmada kullanılan yöntem, baskı ile ayarlanabilen kızılötesi dedektör tasarımı uygulamalarında kullanılabilir.

Anahtar kelimeler: Kuantum kuyusu, çoklu bant etkin kütle yaklaşımı (**k.p** teorisi), sonlu elemanlar yöntemi (FEM), bant içi soğurma, valans band yapısı, band karışımı, ekziton, ekziton bağlanma enerjisi, ekziton soğurma, elektrik alan, hidrostatik basınç, baskı, zorlanma, Luttinger-Kohn Hamiltonianı

ABSTRACT

ELECTRONIC AND OPTIC PROPERTIES OF LOW DIMENSIONAL SEMICONDUCTOR SYSTEMS UNDER HYDROSTATIC STRESS

Metin GÜNEŞ

PhD Dissertation, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin SARI

2009, 221 pages

In the first stage of this study, general information about **k.p** theory for bulk semiconductors and the impact of strain on the band structure of bulk semiconductors. In the second stage, the band structure of quantum wells defined with multi band effective mass approximation (**k.p** theory) and the solution methods are discussed for degenerated and no degenerated bands by using the finite element method (FEM). The effects of stress, electric field and well width on the conduction band structure of a single $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well is calculated with finite element method and the effects of these variables on the intersubband transitions are investigated. In the third stage, the valence band structure of a single $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well system is defined by using both 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonian (including spin orbit split-off band) and 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonian (nonincluding spin orbit split-off band). The effects of the spin orbit band, electric field, well width and the stress applied along five different directions on k_t change of the valence subbands are investigated with finite element methods for degenerated bands. In the final stage, the excitonic structure of a single $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well system is defined with 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonian. The changes in the excitonic structure, exciton binding energy and exciton absorption via well width, electric field and the stress applied in five different directions are investigated with multiband effective mass approximation by combining the finite element method and variational approximation.

According to the findings, the electronic and optic properties of a single $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well system can be adjusted for the changes in

electric field, well width, stress amplitude and stress direction ([100], [001], [110], [111], [hyd] and compressive or tensile). The method used in this study provides a precise description of the electronic and optic properties of quantum well systems based on III-V semiconductor alloys under stress. The results of this study are consistent with the results of Raman and photoluminescence experiments. Since this study has shown that the amplitude and location of an absorption peak can be changed with external parameters (i.e. stress, electric field, well width), the same method can be used for designing IR detectors, which can be adjusted with stress.

Key words: Quantum well, multi bant effective mass approximation (**k.p** theory), finite element method (FEM), intersubband absorption, valence band structure, band mixing, exciton, exciton binding energy, exciton absorption, electric field, hydrostatic pressure, stress, strain, Luttinger-Kohn Hamiltonian

TEŞEKKÜR

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

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

Bilgisayar sistemi ile programlama konularındaki deneyimlerinden yararlandığım ve ileride yapmayı planladığım çalışmalarında da her daim kullanacağım bu bilgiler için sevgili hocam Yrd. Doç. Dr. Kadir AKGÜNGÖR'e, çalışmam esnasında verdiği katkı ve desteğinden dolayı Doç. Dr. Esin KASAPOĞLU'na müteşekkirim.

Ayrıca verdikleri katkı ve desteklerinden dolayı arkadaşlarım Yrd. Doç. Dr. Murat Bursal ve Dr. Aslan Türkoğlu'na gönülden teşekkür ederim.

Bana her konuda sabrı ve sevgisi ile moral veren, hayat arkadaşım, sevgili eşim Emine Gülşen GÜNEŞ'e ve aileme desteklerinden dolayı teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	v
ABSTRACT	vi
TEŞEKKÜR	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	xii
TABLolar DİZİNİ	xvii
1 GİRİŞ	1
2 KÜLÇE YARIİLETKENLER İÇİN k,p TEORİSİ	6
2.1 Tek Bant Durumu	8
2.2 Dejenere Olmayan İki Bant Durumu	10
2.3 Kane Modeli (Dört Bantlı Model)	12
2.4 Luttinger-Kohn Modeli	21
3 ZORLANMANIN KÜLÇE YARIİLETKENİN BANT YAPISINA ETKİSİ	26
3.1 Tek Bant Durumu	31
3.2 Dejenere Bantlar Durumu	32
3.3 Külçe Yarıiletkenin Valans Bandı Yapısı	34
4 ETKİN KÜTLE YAKLAŞIMI (ZARF FONKSİYONU YAKLAŞIMI)	40
4.1 Dejenere Olmayan Tek Bant	40
4.2 Dejenere Bantlar	41
5 YARIİLETKEN KUANTUM KUYULARININ BANT YAPISI	43
5.1 Zorlanmanın Olmadığı Durum	43
5.2 Zorlanmanın Olduğu Durum	48
6 SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ (FİNİTE ELEMENT METHOD)	50
6.1 Baz Fonksiyonları Seçimi	53
6.2 Bir Boyutta Lineer Baz Fonksiyonları	55
6.3 FEM'in Çiftlenimsiz Bantlara Uygulanması	57
6.4 FEM'in Çiftlenimli Bantlara Uygulanması	65
7 ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK BANDI YAPISI VE BANT İÇİ SOĞURMA	75
8 ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN VALANS BANDI YAPISI	93
9 ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNDAKİ EKZİTONLAR	119
10 ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNDA EKZİTON SOĞURMA	151

11 SONUÇLAR	169
KAYNAKLAR	176
EKLER	
EK-1 Kane Modeli İçin Elde Edilen Hamiltoniannın Matris Elemanlarının Bulunması	180
EK-2 Baskı Durumlarına Göre Zorlanma Matrisinin Elemanları	195
EK-3 \overline{H}_A , \overline{H}_B ve \overline{H}_C 'nin Açık Biçimleri	201
EK-4 Üçgen Global Elementin Alan Koordinatları, Biçim Fonksiyonları Ve Bu Fonksiyonlar Kullanılarak Hesaplanan İntegraller	205
EK-5 “Zinc-Blende” Durumu İçin Kinetik Enerji Matrisleri	214
EK-6 “Kronecker” Çarpımı	217
ÖZGEÇMİŞ	219

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	Kane modeline (8x8'lik matris) göre GaAs külçe yarıiletkeninin bant yapısı	20
Şekil 2.2	Luttinger-Kohn modeline (6x6'lık matris) göre GaAs külçe yarıiletkeninin valans bandı yapısı	25
Şekil 3.1	(a) Deforme olmamış kristaldeki A atomu için \vec{r} konum vektörü, (b) Deforme olmuş kristaldeki A atomu için \vec{r}' konum vektörü	26
Şekil 3.2	Külçe $Ga_xIn_{1-x}As$ yarıiletkeninin farklı Ga mol oranları (x) için momentum uzayındaki enerji bant yapısının şekli [39]. (a) İki eksenli baskı (biaxial compression) durumu, (b) Zorlanmanın olmadığı durum, (c) İki eksenli gerilme (biaxial tension) durumu	38
Şekil 5.1	Kuantum kuyusunun bant kenarı profili [39]. (a) baskı zorlanması durumu, (b) zorlanmanın olmadığı durum, (c) gerilme zorlanması durumu	49
Şekil 6.1	z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonları	54
Şekil 6.2	Üç elemanlı çalışma uzayı, lineer baz fonksiyonları ve $[-1,1]$ aralığında elde edilen bazların çalışma uzayına yerleştirilmesi sonucu elde edilen global baz fonksiyonları	55
Şekil 6.3	Çiftlenimsiz bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması	60
Şekil 6.4	Çiftlenimli bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması	69
Şekil 7.1	Sonlu kuantum kuyusunun $F = 0$ (sürekli çizgi) ve $F \neq 0$ (kesikli çizgi) için izinli olası geçişlerin şematik gösterimi	75
Şekil 7.2	$L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk beş enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $S = 0$ (Baskı yok iken), (b) $S = 20$ kbar (Baskı gerilme şeklinde) ve (c) $S = -20$ kbar (Baskı sıkıştırma şeklinde)	81
Şekil 7.3	$F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L = 200 \text{ \AA}$ genişliğindeki $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $S = 0$ (Baskı yok iken), (b) $S = 20$ kbar (Baskı gerilme şeklinde), (c) $S = -20$ kbar (Baskı sıkıştırma şeklinde)	83
Şekil 7.4	$GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki taban durum enerjisinin farklı baskı değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi	84
Şekil 7.5	$L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk iki iletkenlik alt bant enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi	84
Şekil 7.6	$L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk iki iletkenlik alt bant enerjisinin uygulanan elektrik alana göre değişimi	86
Şekil 7.7	$GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi	86
Şekil 7.8	Elektrik alan altında $L = 75 \text{ \AA}$, 100 \AA ve 200 \AA 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyularında 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi	88
Şekil 7.9	$L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusuna uygulanan farklı elektrik alan değerlerinde 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi	88

- Şekil 7.10 Elektrik alanı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi, (a) $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde), (b) $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde) 90
- Şekil 7.11 Elektrik alanı altında $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2, 2-3, 1-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi 92
- Şekil 8.1 $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $L = 50 \text{ \AA}$, (b) $L = 100 \text{ \AA}$ ve (c) $L = 200 \text{ \AA}$ 96
- Şekil 8.2 $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $F = 10 \text{ kV/cm}$, (b) $F = 30 \text{ kV/cm}$ ve (c) $F = 50 \text{ kV/cm}$ 97
- Şekil 8.3 $k_t = 0$ 'da $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimi: (a) $F = 0$ ve (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ 99
- Şekil 8.4 $k_t = 0$ 'da $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin elektrik alana göre değişimi: (a) $L = 100 \text{ \AA}$ ve (b) $L = 200 \text{ \AA}$ 100
- Şekil 8.5 $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$ 102
- Şekil 8.6 $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da A1, A2 alt bantlarına ait normalize dalga fonksiyonlarının mutlak karesinin çizimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$. Burada $|\Psi|^2 = |\Psi_{HH}|^2 + |\Psi_{LH}|^2 + |\Psi_{SO}|^2 = 1$ dir. 103
- Şekil 8.7 $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$ 104
- Şekil 8.8 $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$ 106
- Şekil 8.9 $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$ 108
- Şekil 8.10 Hidrostatik baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$ 109
- Şekil 8.11 $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = -7 \text{ kbar}$, (c) $S = 7 \text{ kbar}$ ve (d) $S = 20 \text{ kbar}$ 111

Şekil 8.12	$S [001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = -5 \text{ kbar}$, (c) $S = 5 \text{ kbar}$ ve (d) $S = 20 \text{ kbar}$	111
Şekil 8.13	$S [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = -7 \text{ kbar}$, (c) $S = 7 \text{ kbar}$ ve (d) $S = 20 \text{ kbar}$	113
Şekil 8.14	$S [111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = -7 \text{ kbar}$, (c) $S = 7 \text{ kbar}$ ve (d) $S = 20 \text{ kbar}$	113
Şekil 8.15	Hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -20 \text{ kbar}$, (b) $S = -7 \text{ kbar}$, (c) $S = 7 \text{ kbar}$ ve (d) $S = 20 \text{ kbar}$	114
Şekil 8.16	$S [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi	114
Şekil 8.17	$S [001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi	116
Şekil 8.18	$S [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi	116
Şekil 8.19	$S [111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi	117
Şekil 8.20	Hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi	118
Şekil 9.1	(a) Elektron ve boşluğun koordinatları ile oluşturulan çalışma uzayının şematik gösterimi, (b) Üçgenleştirme işlemi yapıldıktan sonra çalışma uzayının görünümü	132
Şekil 9.2	Elektrik alan ve baskının olmadığı durumda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki taban durum ekziton enerjisinin boyutsuz varyasyon parametrelerine göre değişimi	133
Şekil 9.3	(a) $S = 0$ durumunda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda ekziton zarf fonksiyonunun bileşenleri, (b) $S [100]$ doğrultusunda $S = 10 \text{ kbar}$ 'lık baskı uygulanması durumunda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda ekziton zarf fonksiyonunun bileşenleri	135
Şekil 9.4	$GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	136
Şekil 9.5	Elektrik alan altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	137

Şekil 9.6	Elektrik alan altındaki $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi, (a) A Ekzitonu için, (b) B Ekzitonu için	139
Şekil 9.7	$L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimi	140
Şekil 9.8	(a) $S [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	141
Şekil 9.8	(b) $S [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi	142
Şekil 9.9	(a) $S [001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	143
Şekil 9.9	(b) $S [001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi	144
Şekil 9.10	(a) $S [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	145
Şekil 9.10	(b) $S [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi	146
Şekil 9.11	(a) $S [111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	147
Şekil 9.11	(b) $S [111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi	148
Şekil 9.12	(a) Hidrostatik baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi	149
Şekil 9.12	(b) Hidrostatik baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi	150
Şekil 10.1	(a) $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TE polarize olması durumu için A-Ekziton soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi	157
Şekil 10.1	(b) $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TM polarize olması durumu için A-Ekziton soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi	157
Şekil 10.2	(a) $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TE polarize durumu için alan altında A ve B-Ekzitonun soğurma katsayılarının foton enerjisine göre değişimi	160
Şekil 10.2	(b) $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TM polarize durumu için alan altında A ve B-Ekzitonun soğurma katsayılarının foton enerjisine göre değişimi	160

Şekil 10.3 (a) $S_{ [100]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)	161
Şekil 10.3 (b) $S_{ [100]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)	161
Şekil 10.4 (a) $S_{ [001]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)	163
Şekil 10.4 (b) $S_{ [001]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)	163
Şekil 10.5 (a) $S_{ [110]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)	165
Şekil 10.5 (b) $S_{ [110]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)	165
Şekil 10.6 (a) $S_{ [111]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)	166
Şekil 10.6 (b) $S_{ [111]}$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)	166
Şekil 10.7 (a) Hidrostatik baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)	168
Şekil 10.7 (b) Hidrostatik baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)	168
Şekil E2.1 Baskı matrisinin elemanları	197

TABLÖLAR DİZİNİ

Tablo 10.1 İletkenlik ve valans bandı Bloch fonksiyonlarının overlabi	155
---	-----

1. GİRİŞ

Yarıiletkenlerin elektronikte kullanılması, belki de katıhal fiziğinin 20. yüzyıl teknolojisine getirdiği en büyük katkıdır. Yarıiletken materyallerin elektriksel ve optik özelliklerinin dış etkilerle (elektrik alan veya farklı doğrultularda uygulanan baskı) değiştirilebilir olması elektronik cihaz yapımında tercih nedenidir [1-3]. Ayrıca yarıiletkenler, günümüzde çok yaygın kullanım alanına sahip olup birçok elektronik devrenin ve çeşitli düzeneklerin temel yapı elemanlarını oluşturarak yaşantımız içinde önemli bir yer tutarlar. Bunun yanında 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 yapılan çalışmalardan bilindiği gibi hidrostatik basınç altındaki düşük boyutlu yarıiletken sistemlerin elektronik ve optik özelliklerinde önemli farklılıklar görülmüştür [11-20]. Özellikle hidrostatik basınç altında bu sistemlerde ölçülen fiziksel büyüklüklerde önemli değişimler elde edilmektedir [4-9]. Bu nedenle, söz konusu olan bu sistemlerin farklı biçimleri için kuramsal ve deneysel çalışmalar yoğun bir şekilde devam etmektedir.

Deneysel kristal büyütme tekniklerindeki yeni gelişmelere bağlı olarak boyutları de Broglie dalga boyu ile kıyaslanabilir yarıiletken yapılar oluşturulmuştur. Düşük boyutlu heteroyapılarda elektronik ve optik özellikler sistemin boyutuna çok duyarlıdır [21-27]. Düşük boyutlu sistemlerin külçe malzemelere göre ilginç olmaları bu sistemlerdeki boyutun farklılığından kaynaklanmaktadır. Örneğin, çoklu $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuyularından oluşan sistemlerde külçe malzemeye göre çok yüksek elektronik mobiliteler ve eksiton bağlanma enerjisinde önemli artışlar gözlenmiştir [28]. Heteroyapılardaki verici safsızlıkların bağlanma enerjisi üzerine hidrostatik basıncın etkisi ilk olarak Elabsy [4] tarafından araştırılmış ve hidrostatik basıncın artmasıyla bağlanma enerjisinin arttığı bulundu.

Kuantum kuyuları bir boyutu kuşatılmış olan yapılardır ve bu yapılar farklı malzemeler ile lazer diyotlar gibi yeni optik aletlerin yapımında kullanılır. Kuantum kuyularında valans bandı enerji band dağılımının ve dalga fonksiyonlarının hesaplanması genellikle çok karmaşıktır ve analitik çözümleri tam olarak yapılamamaktadır. Son zamanlarda düşük boyutlu sistemlerin analizi için birkaç nümerik teknik geliştirildi. Bunlar efektif bağ yörünge metodu (effective bond orbital

method) (EBOM) [30], sıkı bağ metodu (tight binding method) (TBM) [31], sonlu farklar metodu (finite difference method) (FDM) [32] ve sonlu elemanlar metodu (finite element method) (FEM) [33, 34] dir.

EBOM ve TBM ile elektronik bant yapısı iyi bir doğrulukla hesaplanabilmesine karşın her bir atomik durum için 18'den fazla baz fonksiyonuna ve sonuçların elde edilmesi için oldukça büyük hafızalı bilgisayarlar ile çok uzun işlem zamanlarına ihtiyaç vardır [30, 31]. Bununla birlikte, FEM ve FDM için spin yörünge (spin-orbit splitt-off) bandının ihmal edilip edilmemesine bağlı olarak sadece dört veya altı baz fonksiyonuna ihtiyaç vardır. FEM'in avantajı, FDM'in üzerinde bir nümerik teknik olması ve eşit olmayan elementleri kullanabilmesidir. Bu yüzden keyfi biçimli geometrilerin dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerinin analizi doğru olarak yapılabilir [33]. Nakamura ve ark., [35] keyfi potansiyel biçimli kuantum kuyuları için elektronların enerji düzeylerini FEM ile hesapladı. Loehr ve Singh varyasyonel olmayan nümerik hesapla serbest taşıyıcıların, elektrik alanın ve zorlamanın kuantum kuyularındaki eksitonların özellikleri üzerindeki etkisini inceledi [36]. Yi ve Dagli [37] dört band \vec{k}, \vec{p} analizini FEM ile kullanarak benzer kuantum teli örneklerinin optik özellikleri ve valans band yapısını araştırdı.

Ağır boşluk bandı (HH), hafif boşluk bandı (LH) ve spin yörünge boşluk bandı (SO) arasındaki çiftlenimin genelde önemsiz olduğu kabul edilerek birçok hesaplamalarda dikkate alınmaz. Bunun yanında çoğu III-V yarıiletken bileşik için SO bandı, HH ve LH bantlarının birkaç yüz meV altındadır. Bu yüzden SO bandının sorunsuz bir şekilde ihmal edilebileceği düşünülür. Bu durumda HH ve LH bantlarının bant yapısı 4x4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı ile yaklaşık olarak tanımlanır. Bu yaklaşımla 4x4 Hamiltonianla kuantum kuyularındaki alt bant enerjileri üzerine birçok hesaplamalar yapılmıştır [29, 42, 43, 44]. SO bandının ihmal edilmesi etkin kütle ve alt bant enerjileri hesabında önemli sayılabilecek hatalara neden olabilir. Bununla birlikte valans bandındaki spin yörünge çiftleniminin birçok temel özelliği nasıl etkilediği henüz tam olarak bilinmemektedir.

Bir yarıiletkendeki bir elektron kristal örgünün periyodik potansiyeli etkisi altındadır ve bu potansiyel, enerji bantlarının oluşmasına neden olur. Bir yarıiletkenin elektronik bant yapısı, elektron için izinli veya yasaklı enerji durumlarını belirler. Yarıiletkenlerin gerçek bant yapılarının yarıiletkene uygulanan baskıdan etkilenen bazı simetri özellikleri vardır. Bu yüzden baskı altında yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri değişmektedir [3, 38, 42, 45]. Baskı ve zorlanmanın genel fikri elastik

teoriden gelmektedir ve her ikisi de tensörel nicelikler olup birbirleri ile ilişkileri Hook yasasıyla verilmektedir.

Statik elektrik alanın katılarda elektronik durumlar üzerindeki etkileri son yıllarda büyük bir ilgi alanı oluşturmuştur. Yarıiletken kuantum kuyularında yük taşıyıcılarının bir boyutlu potansiyel içinde kuşatılmaları kesikli enerji durumlarının oluşmasını sağlar. Bu da elektronik yapıda önemli değişmelere neden olur. $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyuları üzerinde yapılan yoğun çalışmalarda, kuyularda soğurma ve lüminesans spektrumlarında ekzitonik etkilerin başat olduğu gözlenmiştir. Özellikle saf yarıiletkenlerin düşük sıcaklıktaki soğurma bant sınırı, hidrojenik yörüngede olan elektron ve boşluk çiftinin yarattığı ekzitonun rezonans soğurmasına bağlıdır. Külçe yarıiletkenlerde alana bağlı soğurma bant kenarında oluşan kayma ve genişlemeye Franz-Keldysh etkisi adı verilir. Kuantum kuyularında bu etkiye kuantum kuşatma Stark etkisi (Quantum Confined Stark Effect (QCSE)) denmektedir. Elektro-soğurmaya uygun bir model oluşturulurken ekzitonik etkilerin hesaba katılması gerekir. $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ sisteminde $Ga_{1-x}Al_xAs$ materyali $GaAs$ 'e göre düşük valans bandı ve yüksek iletim bandına sahip olduğundan, $Ga_{1-x}Al_xAs$ engel etkisi gösterir. $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ sistemlerini ince katmanlar şeklinde yan yana dizerek oluşturulan yapıda elektron ve boşluklar $GaAs$ katmanlarında kuşatılırlar. Buna bağlı olarak, ekzitonlar da bu katmanlarda oluşur. $Ga_{1-x}Al_xAs$ engelleri yeterli kalınlık ve alüminyum konsantrasyonuna sahip ise, potansiyel engeli $GaAs$ katmanında kuşatılmış parçacıkların başka $GaAs$ katmanına geçmelerine olanak vermez. Bu koşulları sağlayan yapılara çoklu kuantum kuyuları adı verilir. Bu yapılarda, düşük enerji durumları için yapılan fizik, aslında tek kuantum kuyusu fiziğine özdeştir. Dalga fonksiyonunun engel içine önemli boyutlarda sızması durumunda, süper örgü etkileri oluşmaya başlar ve olayın fiziği nicel olarak değişir. Yapının katman kalınlıkları üç boyutlu ekziton yarıçapından çok küçük olsa bile ekziton rezonansı görülebilir. Bu durumu göz önüne alarak, kuantum kuşatmadan dolayı buradaki fiziğin külçedekinden çok farklı olduğunu söyleyebiliriz. Özellikle elektro soğurma olayında hangi faktörlerin etkili olduğu üzerinde durulması gereken bir sorudur. Kuşatılmadan dolayı elektrik alanı altında kuantum kuyularında meydana gelen etkilerin külçedeki etkilerden farklı olacağı açıktır. Kuantum kuyularını ilginç kılan bir başka olay ise, bu sistemlerde oda sıcaklığında bile ekziton rezonanslarının açıkça gözlenmesidir. Oysa $GaAs$ ve diğer birçok yarıiletken külçede oda sıcaklığında çözülebilir ekziton rezonansı gözlenemez. Oda sıcaklığında

gözlenen bu ekzitonik etkiyi temel alan yeni optik cihazlar geliştirilmiştir. Ayrıca, $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyularındaki elektro soğurma etkilerini yararlı kılan lineer olmayan optik cihazlar denenmiş ve daha da önemlisi üzerinde tartışılan birçok optik modülatör ve devre elemanının temelini yine bu etkiler oluşturmaktadır. Elektrik alanı altında kuantum kuyularının optik özelliklerindeki değişimler birçok kişi tarafından teorik ve deneysel olarak incelenmiştir. Çalışmaların çoğunda varyasyonel yaklaşım metodu kullanılmıştır [46]. Kuantum kuyusu sistemlerinde, alan altında soğurma spektrumunda yüksek alanlarda bile ekziton rezonansının olmasının yanında, sıfır alanda yasak olan geçişlerin gözlenmesi ise üzerinde durulması gereken bir başka konudur[47, 48].

III-V bileşiklerinden oluşan kuantum kuyularında bant aralığına yakın foton enerjilerinde meydana gelen ekzitonik soğurma elektronik aygıt tasarımı için büyük bir ilgi alanıdır. Kuantum kuyu düzlemine dik uygulanan elektrik alan ile ekziton soğurma genliği ve enerjisi ayarlanabilmektedir [49]. Bu ayarlama, QCSE etkisiyle elektrik alana bağlı soğurmanın etkilenmesi sonucunda yapılabilmektedir. QCSE'in performanstaki bu avantajı dolayısıyla optik modülatör ve dedektör tasarımında kullanılır [50, 51, 52]. Genel olarak bu aygıtlar $GaAs/GaAlAs$ ve ya $InP/InGaAsP$ yarıiletken malzemelerin basit dikdörtgen kuantum kuyusu sistemlerinden yapılırlar.

Bu tez çalışmasında, büyütme doğrultusunda uygulanan elektrik alan ve beş farklı doğrultuda uygulanan baskı altındaki $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özellikleri çoklu bant etkin kütle yaklaşımı (**k.p** teorisi) çerçevesinde sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ve varyasyonel yaklaşım metodunun birlikte kullanılması ile incelendi.

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

Bölüm 3'te zorlanmanın külçe yarıiletkenlerin bant yapısı üzerinde ne tür değişmelere sebep olduğu konusu üzerinde durulmuştur.

Bölüm 4'te etkin kütle yaklaşımı (zarf fonksiyonu yaklaşımı) özet olarak verilmiştir.

Bölüm 5'te yarıiletken kuantum kuyularının bant yapısının zorlanmanın olduğu ve olmadığı durumda hangi denklemler ile çözüm yapılacağı üzerinde durulmuştur.

Bölüm 6'da sonlu elemanlar yöntemi (FEM) hakkında genel bilgiler verilerek, çiftlenimli ve çiftlenimsiz bantlara bu yöntemin uygulanabilmesi için gerekli analitik işlemler yapılmıştır.

Bölüm 7’de elektrik alan ve baskı altında $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandı yapısı ve bant içi soğurma katsayısı sonlu elemanlar yöntemi ile hesaplandı.

Bölüm 8’de FEM kullanılarak $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans bandı yapısı araştırıldı. Valans bandı yapısı hem spin-orbit etkileşme bandını içeren 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonianı hem de spin-orbit etkileşme bandını içermeyen 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı kullanılarak tanımlandı. Valans bandında spin-orbit çiftleniminin, elektrik alanın, kuyu boyutlarının ve beş farklı doğrultuda uygulanan baskının etkisi incelendi. Bildiğimiz kadarıyla, şu ana kadar elektrik alan ve beş farklı baskı altında sonlu elemanlar yöntemi ile $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans bandı yapısında spin-orbit çiftleniminin olduğu ve olmadığı durumun karşılaştırılması yapılmamıştır.

Bölüm 9’da elektrik alan ve baskı altında $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ekzitonlar incelendi. Burada, valans bandı 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı ile tanımlandı. Elektrik alana ve uygulanan baskıya bağlı olarak ekziton enerjileri, ekziton dalga fonksiyonları ve ekziton bağlanma enerjileri varyasyonel hesap tekniğinin sonlu elemanlar yöntemi ile birlikte kullanılması sonucunda elde edilmiştir.

Bölüm 10’da elektrik alan ve baskı altında $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ekzitonik soğurma enine elektrik alan (transverse electric) (TE) ve enine manyetik alan (transverse magnetic) (TM) doğrultusunda polarize olmuş ışık için incelenmiştir.

Bölüm 11’de ise, $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özellikleri için elde edilen sonuçlar verilmiştir. Sonuçların teknolojiye ve aygıt tasarımına getireceği katkılar üzerinde tartışılmıştır.

2. KÜLÇE YARIİLETKENLER İÇİN k,p TEORİSİ

Periyodik potansiyelde bulunan bir elektron için

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \quad (2.1)$$

dir. Burada $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ örgü öteleme vektörüdür. $\psi(\vec{r})$ periyodik potansiyeldeki elektronun dalga fonksiyonu ise,

$$H\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E(\vec{k})\psi(\vec{r}) \quad (2.2)$$

özdeğer denklemi yazılabilir. $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{R}$ dönüşümü altında H invariant ve $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ denklem (2.2)'yi sağlar.

Denklem (2.2)'nin genel çözümü (Bloch Fonksiyonu)

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

biçimindedir. Bloch teoremine göre;

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.4)$$

ve n. banttaki \vec{k} dalga vektörlü elektronun enerjisi $E = E_n(\vec{k})$ ile verilir. İlgilenilen yer valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu arası $\vec{k} = \vec{k}_0 = 0$ 'da olsun. n. banttaki \vec{k} dalga vektörlü elektron için Schrödinger denklemi

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.5)$$

dir. Burada denklem (2.3) kullanılır ise,

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

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\nabla \left((i\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right) + \nabla \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right) \right] + V(\vec{r}) \left[e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] = E_n(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[(i\vec{k})^2 e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + (i\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + (i\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\vec{r}} \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] = E_n(\vec{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}) + 2(i\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\
& + V(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} e^{i\vec{k}\vec{r}} \left[-k^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + 2(i\vec{k}) \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + e^{i\vec{k}\vec{r}} V(\vec{r}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} E_n(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-k^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + 2(i\vec{k}) \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] + V(\vec{r}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{i\hbar^2 \vec{k}}{m_0} \nabla U_{n\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 U_{n\vec{k}}(\vec{r}) + V(\vec{r}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) - \frac{i\hbar^2 \vec{k}}{m_0} \nabla \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot (-i\hbar \nabla) \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\
& \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.6}
\end{aligned}$$

elde edilir. Denklem (2.6)

$$\left[H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.7}$$

şeklinde yazılabilir. Burada, (2.6) denklemindeki operatörün $k = 0$ 'daki değeri

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \tag{2.8}$$

dir ve (2.6) denklemi $k = 0$ 'da

$$H_0 U_{n0}(\vec{r}) = E_n(0) U_{n0}(\vec{r}) \tag{2.9}$$

şeklinde yazılabilir.

2.1. Tek Bant Durumu

Buradaki amaç diğerleri ile etkileşimi olmayan n. bandı için (2.7) denklemini çözmek. $k \approx 0$ için (2.7) denklemi zamandan bağımsız pertürbasyon yöntemi ile ele alınabilir.

- Enerji için 2. mertebe perturbasyondan

$$E_n = E_n^0 + H'_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

denklemini elde edilir.

- Dalga fonksiyonu için 1. mertebe perturbasyondan

$$\Psi_n = \phi_n^0 + \sum_{m \neq n} \frac{H'_{nm}}{E_n^0 - E_m^0} \phi_m^0$$

denklemini elde edilir.

(2.7) denkleminde, $H'_{nm} = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nm}$ olmak üzere,

$$E_n(\vec{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} \quad (2.10)$$

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = U_{n0}(\vec{r}) + \sum_{n' \neq n} \frac{\hbar}{m_0} \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}}{E_n^0 - E_{n'}^0} U_{n'0}(\vec{r})$$

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} a_{n'} U_{n'0}(\vec{r}) \quad (2.11)$$

- Momentum matris elemanları,

$$p_{nn'} = \int_{\text{birim hücre}} U_{n0}^*(\vec{r}) \vec{p} U_{n'0}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2.12)$$

- $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ dalga fonksiyonları

$$\int_{\text{birim hücre}} U_{n0}^*(\vec{r}) U_{n'0}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{nn'} \quad (2.13)$$

dikeboyluluk şartını sağlarlar.

Eğer $E_n(\vec{k})$, \vec{k}_0 da ekstremuma sahipse $\vec{k} = \vec{k}_0 = 0$ civarında $E_n(\vec{k})$, \vec{k} 'ya kuadratik bağlı olmalı ve $\vec{p}_{nn} = 0$ olmalı. (2.10) denkleminde

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}$$

elde edilir. \vec{k} ve \vec{p} vektörler, $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ve $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ise,

$$\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} = k_x p_{nn'}^x + k_y p_{nn'}^y + k_z p_{nn'}^z$$

Dolayısıyla $|\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2$ matrisinin karesi

$$(k_x p_{nn'}^x + k_y p_{nn'}^y + k_z p_{nn'}^z)(k_x p_{n'n}^x + k_y p_{n'n}^y + k_z p_{n'n}^z)$$

Açılım yapılırsa,

$$\begin{aligned} & p_{nn'}^x p_{n'n}^x k_x k_x + p_{nn'}^x p_{n'n}^y k_x k_y + p_{nn'}^x p_{n'n}^z k_x k_z \\ & p_{nn'}^y p_{n'n}^x k_y k_x + p_{nn'}^y p_{n'n}^y k_y k_y + p_{nn'}^y p_{n'n}^z k_y k_z \\ & p_{nn'}^z p_{n'n}^x k_z k_x + p_{nn'}^z p_{n'n}^y k_z k_y + p_{nn'}^z p_{n'n}^z k_z k_z \end{aligned}$$

$\alpha, \beta = x, y, z$ olmak üzere $p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta$ terimleri,

$$\frac{1}{2} [p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{nn'}^\beta p_{n'n}^\alpha]$$

olarak yazılabilir. Yani, $|\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2$ bu terimlerin toplamlarından oluşacaktır.

$$|\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} [p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{nn'}^\beta p_{n'n}^\alpha] k_\alpha k_\beta$$

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ terimindeki k^2 ise, (\vec{k} , üç bileşenli bir vektördü) $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ olur. Bu sonuçlar

(2.10)'dan elde edilen bağıntıda yerlerine yazılırsa,

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}$$

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{\alpha, \beta} k_\alpha k_\beta \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{n' \neq n} \left\{ \frac{1}{E_n^0 - E_{n'}^0} \sum_{\alpha, \beta} [p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{nn'}^\beta p_{n'n}^\alpha] k_\alpha k_\beta \right\}$$

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{\alpha, \beta} k_\alpha k_\beta \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{n' \neq n} \left\{ \frac{1}{E_n^0 - E_{n'}^0} [p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{nn'}^\beta p_{n'n}^\alpha] k_\alpha k_\beta \right\}$$

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{1}{E_n^0 - E_{n'}^0} [p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{nn'}^\beta p_{n'n}^\alpha] \right\} k_\alpha k_\beta$$

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \sum_{\alpha, \beta} D^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta$$

Burada

$$D^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{1}{E_n^0 - E_{n'}^0} [p_{m'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{m'}^\beta p_{n'n}^\alpha]$$

dir ve

$$E_n(\vec{k}) - E_n^0 = \sum_{\alpha,\beta} D^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \quad (2.14)$$

$$D^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{p_{m'}^\alpha p_{n'n}^\beta + p_{m'}^\beta p_{n'n}^\alpha}{E_n^0 - E_{n'}^0} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} \quad (2.15)$$

$\alpha, \beta = x, y, z$ olmak üzere, $D^{\alpha\beta}$ matrisi simetrik ve matris formundaki ters efektif kütle ile $\frac{\hbar^2}{2}$ nin çarpımına eşittir.

2.2. Dejenere Olmayan İki Bant Durumu

Buradaki amaç iki tane, birbiriyle etkileşen ve dejenere olmamış band için (2.7) denklemini çözmektir. Çözüm olarak,

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) \quad (2.16)$$

önerilir ve (2.7) denkleminde yazılırsa,

$$\begin{aligned} \left[H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) &= \left[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) \\ H_0 \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) &= E_n(\vec{k}) \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) \\ - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) & \\ \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) H_0 U_{n'0}(\vec{r}) + \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} U_{n'0}(\vec{r}) &= \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) \\ - \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} U_{n'0}(\vec{r}) & \\ \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(0) U_{n'0}(\vec{r}) + \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} U_{n'0}(\vec{r}) &= \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) U_{n'0}(\vec{r}) \\ - \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} U_{n'0}(\vec{r}) & \end{aligned}$$

bulunur ve yukarıdaki denklem soldan $U_{n0}^*(\vec{r})$ ile çarpılırsa,

$$\begin{aligned}
& U_{n_0}^*(\vec{r}) \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_{n'}(0) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) + U_{n_0}^*(\vec{r}) \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) = \\
& U_{n_0}^*(\vec{r}) \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) - U_{n_0}^*(\vec{r}) \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) \\
& \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_{n'}(0) U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) + \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} U_{n_0}^*(\vec{r}) \vec{k} \cdot \vec{p} \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) = \\
& \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) - \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r})
\end{aligned}$$

elde edilir. Birim hücre boyunca integral alınırsa,

$$\begin{aligned}
& \int_{\text{birim hücre}} \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_{n'}(0) U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) + \int_{\text{birim hücre}} \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} U_{n_0}^*(\vec{r}) \vec{k} \cdot \vec{p} \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) = \\
& \int_{\text{birim hücre}} \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) - \int_{\text{birim hücre}} \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) \\
& \sum_{n'} \left\{ a_{n'}(\vec{k}) E_{n'}(0) \int_{\text{birim hücre}} U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) \right\} + \sum_{n'} \left\{ a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} \int_{\text{birim hücre}} U_{n_0}^*(\vec{r}) \vec{k} \cdot \vec{p} \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) \right\} = \\
& \sum_{n'} \left\{ a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) \int_{\text{birim hücre}} U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) \right\} - \sum_{n'} \left\{ a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \int_{\text{birim hücre}} U_{n_0}^*(\vec{r}) \mathcal{U}_{n'_0}(\vec{r}) \right\}
\end{aligned}$$

(2.12) ve (2.13) denklemleri kullanılarak,

$$\begin{aligned}
& \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_{n'}(0) \delta_{mn'} + \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{mn'} = \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_n(\vec{k}) \delta_{mn'} - \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{mn'} \\
& \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) E_{n'}(0) \delta_{mn'} + \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{mn'} + \sum_{n'} a_{n'}(\vec{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{mn'} = a_n(\vec{k}) E_n(\vec{k}) \\
& \sum_{n'} \left\{ \left[E_{n'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{mn'} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{mn'} \right\} a_{n'}(\vec{k}) = E_n(\vec{k}) a_n(\vec{k}) \tag{2.17}
\end{aligned}$$

bulunur. Etkileşen α ve β bandları için (2.17)'den

$$\begin{aligned}
& \sum_{n'=\alpha,\beta} \left\{ \left[E_{n'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\alpha n'} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\alpha n'} \right\} a_{n'}(\vec{k}) = E_\alpha(\vec{k}) a_\alpha(\vec{k}) \\
& \sum_{n'=\alpha,\beta} \left\{ \left[E_{n'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\beta n'} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\beta n'} \right\} a_{n'}(\vec{k}) = E_\beta(\vec{k}) a_\beta(\vec{k})
\end{aligned}$$

şeklinde iki denklem elde edilir. Toplamlar açılırsa,

$$\left\{ \left[E_\alpha(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\alpha\alpha} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\alpha\alpha} \right\} a_\alpha(\vec{k}) + \left\{ \left[E_\alpha(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\alpha\beta} \right\} a_\beta(\vec{k})$$

$$= E_\alpha(\vec{k}) a_\alpha(\vec{k})$$

$$\left\{ \left[E_\beta(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\beta\alpha} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\beta\alpha} \right\} a_\alpha(\vec{k}) + \left\{ \left[E_\beta(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\beta\beta} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\beta\beta} \right\} a_\beta(\vec{k})$$

$$= E_\beta(\vec{k}) a_\beta(\vec{k})$$

şekline gelir. $\vec{p}_{nn} = 0$ ve δ fonksiyonunun özelliğini kullanarak

$$\left(E_\alpha(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) a_\alpha(\vec{k}) + \left(\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\alpha\beta} \right) a_\beta(\vec{k}) = E_\alpha(\vec{k}) a_\alpha(\vec{k})$$

$$\left(\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\beta\alpha} \right) a_\alpha(\vec{k}) + \left(E_\beta(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) a_\beta(\vec{k}) = E_\beta(\vec{k}) a_\beta(\vec{k})$$

elde edilir. Buradan,

$$\left(E_\alpha(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_\alpha(\vec{k}) \right) a_\alpha(\vec{k}) + \left(\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\alpha\beta} \right) a_\beta(\vec{k}) = 0$$

$$\left(\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\beta\alpha} \right) a_\alpha(\vec{k}) + \left(E_\beta(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_\beta(\vec{k}) \right) a_\beta(\vec{k}) = 0$$

denklem sistemini matris formunda yazarsak,

$$\begin{pmatrix} E_\alpha(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_\alpha(\vec{k}) & \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\alpha\beta} \\ \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\beta\alpha} & E_\beta(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_\beta(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\alpha \\ a_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

olur. Denklemin çözümü için

$$\begin{vmatrix} E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E & \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} \\ \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{n'n} & E_{n'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E \end{vmatrix} = 0$$

olmalıdır. Buradan enerji özdeğerleri bulunabilir.

2.3. Kane Modeli (Dört Bantlı Model)

Bu modelde spin-yörünge etkileşimi de hesaba katılır. Bu modelde her biri iki katlı dejenere olan dört bantla ilgilenilir. Bunlar, iletkenlik bandı, ağır boşluk bandı, hafif boşluk bandı ve spin-yörünge bandıdır.

Sistemin Hamiltoniyeni, H_0 (2.8) denklemi ile verilmek üzere, $\vec{k}_0 = 0$ civarında,

$$H = H_0 + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \quad (2.19)$$

dir. Buradaki ikinci terim spin yörünge etkileşimini anlatan terimdir. Burada $\vec{\sigma}$, Pauli spin matrisleridir ve aşağıdaki bileşenlerle verilirler.

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

Sırası ile yukarı ve aşağı spin operatörleri de

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

biçiminde verilirler ve Pauli spin matrisleri spin durumlarına etki ettiklerinde

$$\begin{aligned} \sigma_x \uparrow &= \downarrow & \sigma_y \uparrow &= i \downarrow & \sigma_z \uparrow &= \uparrow \\ \sigma_x \downarrow &= \uparrow & \sigma_y \downarrow &= -i \uparrow & \sigma_z \downarrow &= -\downarrow \end{aligned} \quad (2.20)$$

durumları elde edilir. $\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} = \vec{S}$ olduğundan,

$$\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] = \frac{1}{2m_0^2c^2} \vec{S} \cdot [\vec{\nabla}V \times \vec{p}]$$

yazılabilir. Merkezi potansiyelde bulunan serbest bir atom için,

$$\vec{\nabla}V = \frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r}$$

olduğundan

$$\frac{1}{2m_0^2c^2} \vec{S} \cdot \left[\frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \times \vec{p} \right] = \frac{1}{2m_0^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \cdot [\vec{r} \times \vec{p}] = \frac{1}{2m_0^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

yazılabilir. Böylece yukarıdaki terimin de spin-yörünge etkileşme terimini temsil ettiği ispatlanmış olur.

Bloch fonksiyonu için Schrödinger denklemi,

$$\left\{ \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \right\} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.21)$$

şeklinde yazılır. Burada (2.3) denklemi kullanılırsa,

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

yazılabilir. Ayrıca,

$$\vec{\sigma} \cdot [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] = [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} = \vec{p} \cdot [\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V] = [\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V] \cdot \vec{p}$$

ve

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$$

olduğu kullanılırsa,

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

yazılır. Soldaki ilk terimin açılımı daha önce hesaplanmıştı,

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

Dolayısıyla sadece

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

terimini hesaplamak yeterli olur.

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

Daha önce yapıldığı gibi $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ terimi sadeleştirilirse,

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

elde edilir. Dolayısıyla,

$$E' = E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

olmak üzere

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E' U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.22)$$

elde edilmiş olur.

(2.22)'nin sol tarafındaki son terim \vec{k} ya bağlı spin-yörünge etkileşimi terimidir. Bu terim diğerlerinin yanında oldukça küçüktür. Çünkü, spin-yörünge etkileşiminin büyük kısmının oluştuğu atomun içlerinde kristal momentumu $\hbar\vec{k}$ atomun momentumu \vec{p} yanında oldukça küçüktür. Dolayısıyla (2.22)

$$H U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \simeq \left[H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E' U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.23)$$

olarak göz önüne alınabilir.

Şimdi (2.23)'ün E' özdeğerlerine karşılık gelen

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} a_{n'} U_{n'0}(\vec{r})$$

özfonksiyonlarını arıyoruz. Burada $U_{n'0}(\vec{r})$ 'lar band kenarı (band edge)

fonksiyonlarıdır ve

- İletkenlik bandı için E_s özenerjili $|S \uparrow\rangle$, $|S \downarrow\rangle$ (s tipi, elektronların dalga fonksiyonları iletkenlik bandının minimumunda bu tiptedir)
- Valans bandı için E_p özenerjili $|X \uparrow\rangle$, $|Y \uparrow\rangle$, $|Z \uparrow\rangle$, $|X \downarrow\rangle$, $|Y \downarrow\rangle$, $|Z \downarrow\rangle$ (p tipi, elektronların dalga fonksiyonları valans bandının maksimumunda bu tiptedir)

dir. Her iki band için, fonksiyonlar H_0 'a göre dejeneredir.

$$H_0 |S \uparrow\rangle = E_s |S \uparrow\rangle \quad H_0 |X \uparrow\rangle = E_p |X \uparrow\rangle \quad H_0 |Y \uparrow\rangle = E_p |Y \uparrow\rangle$$

$$H_0 |Z \uparrow\rangle = E_p |Z \uparrow\rangle$$

$$H_0 |S \downarrow\rangle = E_s |S \downarrow\rangle \quad H_0 |X \downarrow\rangle = E_p |X \downarrow\rangle \quad H_0 |Y \downarrow\rangle = E_p |Y \downarrow\rangle \quad H_0 |Z \downarrow\rangle = E_p |Z \downarrow\rangle$$

Baz fonksiyonlarını şu şekilde seçmek gelenekseldir.

$$|iS \downarrow\rangle \quad \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle \quad |Z \downarrow\rangle \quad \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle$$

$$|iS \uparrow\rangle \quad \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle \quad |Z \uparrow\rangle \quad \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle$$

Valans bandı baz fonksiyonları küresel harmoniklerdir.

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} = |Z\rangle$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x-iy}{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} |X-iY\rangle$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x+iy}{r} = -\frac{1}{\sqrt{2}} |X+iY\rangle$$

$\vec{k} = k \hat{z}$ olduğunu kabul edersek, bu bazda (2.23)'teki Hamiltoniyenin matris temsili (8x8)

$$\begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

olur. Bu modelde Hamiltoniyenin matris elemanlarının bulunması için yapılan işlemler **EK-1**'de verilmiştir. Burada,

$$H = \begin{pmatrix} E_s & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_p - \frac{\Delta}{3} & \sqrt{2} \frac{\Delta}{3} & 0 \\ kP & \sqrt{2} \frac{\Delta}{3} & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p + \frac{\Delta}{3} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

dır. Kane parametresi P ve spin-yörünge enerjisi Δ

$$P \equiv -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle$$

$$\Delta \equiv \frac{3\hbar i}{4m_0^2 c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right| Y \right\rangle$$

ile tanımlıdır.

Seçilen bazda (2.23)'ün matris temsilinin (2.24) olarak çıkması Hamiltoniyenin özdeğerlerinin bulunması problemini (2.25)'in özdeğerlerinin bulunması problemine indirger. $E_s = E_g$ ve $E_p = -\Delta/3$ olarak tanımlanması ile (2.25) denklemi,

$$H = \begin{pmatrix} E_g & 0 & kP & 0 \\ 0 & -\frac{2\Delta}{3} & \sqrt{2} \frac{\Delta}{3} & 0 \\ kP & \sqrt{2} \frac{\Delta}{3} & -\frac{\Delta}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

haline gelir. $\det|H-E'I|=0$ denkleminin çözümü ile özdeğerler bulunabilir. Son kolon ve son satırın 0 olması ilk özdeğeri

$$E' = 0 \quad (2.27)$$

olmasını gerektirir. Karakteristik denklemin E' ile bölünmesi ile elde edilen denklemden de diğer üç özdeğer bulunur;

$$E'(E'-E_g)(E'+\Delta) - k^2 P^2 \left(E' + \frac{2\Delta}{3} \right) = 0 \quad (2.28)$$

k^2 çok küçük olduğundan (2.28)'in üç kökü $E' = E_g$, $E' = 0$ ve $E' = -\Delta$ 'ya çok yakındır.

- $\varepsilon \ll \Delta$ ve $\varepsilon \ll E_g$ olmak üzere $E' = E_g + \varepsilon(k^2)$ olsun, (2.28)'den

$$\varepsilon \approx \frac{k^2 P^2 (E_g + 2\Delta/3)}{E_g (E_g + \Delta)} \quad (2.29)$$

- $\varepsilon \ll \Delta$ ve $\varepsilon \ll E_g$ olmak üzere $E' = 0 + \varepsilon(k^2)$ olsun, (2.28)'den

$$\varepsilon \approx -\frac{2k^2 P^2}{3E_g} \quad (2.30)$$

- $\varepsilon \ll \Delta$ ve $\varepsilon \ll E_g$ olmak üzere $E' = -\Delta + \varepsilon(k^2)$ olsun, (2.28)'den

$$\varepsilon \approx \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad (2.31)$$

bulunur. $E' = E_n(k) - \hbar^2 k^2 / 2m_0$ olduğu hatırlanırsa Hamiltoniyeinin özdeğerleri (2.27), (2.29), (2.30), (2.31) ile belirlenir (enerjiler yukarıdan aşağıya olmak üzere)

- $n = c$

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2 (E_g + 2\Delta/3)}{E_g (E_g + \Delta)} \quad (2.32)$$

- $n = hh$

$$E_{hh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.33)$$

- $n = lh$

$$E_{lh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2k^2 P^2}{3E_g} \quad (2.34)$$

- $n = so$

$$E_{so}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad (2.35)$$

Bu modelde diğer bandların etkisi hesaba katılmadığından sonuçların tamlığından bahsedilemez. (Luttinger-Kohn modelinde bu etkiler de hesaba katılır.)

(2.24)'ün öz fonksiyonları da (2.25) aracılığı ile bulunabilir.

İlk 4x4 matris için,

$$\phi_{hh,\alpha} = \left| -\left(\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\right) \uparrow \right\rangle \quad \text{ağır boşluk için} \quad (2.36)$$

$$\phi_{n,\alpha} = a_n |iS \downarrow\rangle + b_n \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle + c_n |Z \downarrow\rangle \quad (n = c, lh, so) \quad (2.37)$$

İkinci 4x4 matris için,

$$\phi_{hh,\beta} = \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle \quad \text{ağır boşluk için} \quad (2.38)$$

$$\phi_{n,\beta} = a_n |iS \uparrow\rangle + b_n \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle + c_n |Z \uparrow\rangle \quad (n = c, lh, so) \quad (2.39)$$

yazılır. İletkenlik bandı, hafif boşluk, spin yörünge bandına ait özvektörlerin bulunması için (2.26) ile özdeğer denklemi kurulur,

$$\begin{pmatrix} E_g & 0 & kP & 0 \\ 0 & -\frac{2\Delta}{3} & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & 0 \\ kP & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & -\frac{\Delta}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ 0 \end{pmatrix} = E'_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ 0 \end{pmatrix}$$

Bu ise şuna eşdeğerdir,

$$\begin{pmatrix} E_g & 0 & kP \\ 0 & -\frac{2\Delta}{3} & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} \\ kP & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & -\frac{\Delta}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \end{pmatrix} = E'_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

E'_n yerine (2.32), (2.34), (2.35) deki deęerler yazıldığında sırasıyla, iletkenlik bandı, hafif boşluk ve spin-yörünge bandının öz vektörleri bulunacaktır. $(a_n^2 + b_n^2 + c_n^2)^{1/2} = 1$ normalizasyon koşulu altında ve $k^2 \rightarrow 0$ limitinde,

$$n = c \quad a \approx 1, \quad b \approx 0, \quad c \approx 0 \quad (2.41)$$

$$n = lh \quad a \approx 0, \quad b \approx \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad c \approx \sqrt{\frac{2}{3}} \quad (2.42)$$

$$n = so \quad a \approx 0, \quad b \approx \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad c \approx -\sqrt{\frac{1}{3}} \quad (2.43)$$

bulunur. Sonuç olarak ele alınan dört bandın enerjileri ve öz fonksiyonları şöyle olur;

- **İletkenlik bandı:** (2.32), (2.37), (2.39), (2.41)'den

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2 (E_g + 2\Delta/3)}{E_g (E_g + \Delta)} \quad \left(\equiv E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \right) \quad (2.44)$$

$$\phi_{c,\alpha} = |iS \downarrow\rangle \quad (2.45)$$

$$\phi_{c,\beta} = |iS \uparrow\rangle \quad (2.46)$$

- **Valans bandı:**

Ađır boşluk: (2.33), (2.36), (2.38)'den

$$E_{hh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad \left(\equiv -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}^*} \right) \quad (2.47)$$

$$\phi_{hh,\alpha} = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \equiv \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \quad (2.48)$$

$$\phi_{hh,\beta} = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \equiv \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \quad (2.49)$$

Hafif boşluk: (2.34), (2.37), (2.39), (2.42)'den

$$E_{lh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2k^2 P^2}{3E_g} \quad \left(\equiv -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}^*} \right) \quad (2.50)$$

$$\phi_{lh,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \equiv \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.51)$$

$$\phi_{lh,\beta} = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle \equiv \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.52)$$

Spin-Yörünge bandı: (2.35), (2.37), (2.39), (2.43)'ten

$$E_{so}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad \left(\equiv -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}^*} \right) \quad (2.53)$$

$$\phi_{so,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |Z \downarrow\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.54)$$

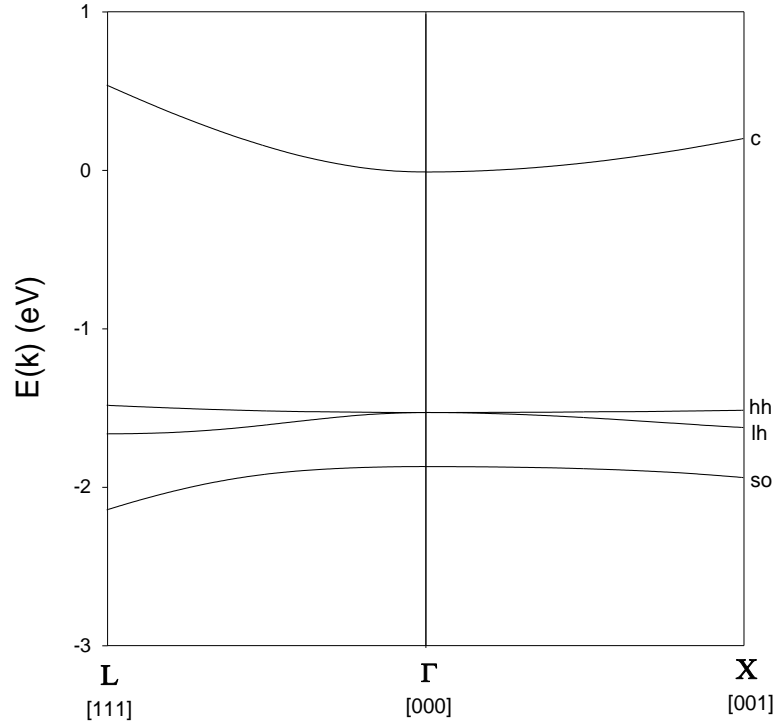
$$\phi_{so,\beta} = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |Z \uparrow\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.55)$$

P Kane parametresi, (2.44) denklemi kullanılarak, elektronun efektif kütlesi (m_e^*) ile ilişkilendirilebilir.

$$E_c(k) - E_g = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2 (E_g + 2\Delta/3)}{E_g (E_g + \Delta)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

$$P^2 = \left(1 - \frac{m_e^*}{m_0} \right) \frac{\hbar^2 E_g (E_g + \Delta)}{2m_e^* (E_g + 2\Delta/3)} \quad (2.56)$$

Sonuç olarak, (2.23)'teki Hamiltoniyeenin öz vektörleri (2.45), (2.46), (2.48), (2.49), (2.51), (2.52), (2.54), (2.55) ile verilir. Bunlara karşılık gelen enerji öz değerleri, $k \rightarrow 0$ limitinde E_g , 0, 0, $-\Delta$ değerlerine giderler. GaAs yarıiletken külçe malzemesine Kane modeli uygulandığında enerji bant diyagramı aşağıdaki gibi elde edilir.



Şekil 2.1. Kane modeline (8x8'lik matris) göre GaAs külçe yarıiletkeninin bant yapısı

2.4. Luttinger-Kohn Modeli

Bu modelde sadece valans bandları ile ilgilenilir. Çünkü, Kane modeli iletkenlik bandında bulunan bir elektronun etkin kütlesi için çok iyi sonuç verir. Bunun yanında Kane modeline göre, valans bandındaki ağır boşlukların etkin kütlesi serbest elektron etkin kütlesi ile aynı çıkar. Bu sonuçtan dolayı Luttinger-Kohn modelinde valans bantları üzerine odaklanılır. Burada ilgilenilen bantlar; her biri iki katlı dejenere ağır boşluk bandı, hafif boşluk bandı, spin-yörünge bandıdır.

Schrödinger denkleminde n alt indisi yazılmaz ise,

$$HU_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k})U_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.57)$$

olur. Denklem (2.22) ile verilen Hamiltoniyeni farklı bir biçimde yazarsak,

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

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \quad (2.58)$$

$$H' = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{\Pi} \quad (2.59)$$

$$\vec{\Pi} = \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \times \nabla V \quad (2.60)$$

olmak üzere sistemin Hamiltoniyeni,

$$H = H_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} + H' \quad (2.61)$$

olur. Daha önceki bölümde de belirtildiği gibi denklem (2.22)'deki son terim diğerlerinin yanında çok küçüktür. Çünkü, $\hbar k \ll p = \langle u_k | p | u_k \rangle \simeq \hbar/a$ ve $\vec{k}_0 (=0)$ civarında atomik yörüngedeki elektronun hızı \vec{k} dalga vektörlü dalga paketinin hızından daha büyüktür. Hamiltoniyenin öz fonksiyonu Löwdin perturbasyon metodu kullanılarak

$$U_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{j'}^A a_{j'}(\vec{k}) U_{j'_0}(\vec{r}) + \sum_{\gamma}^B a_{\gamma}(\vec{k}) U_{\gamma_0}(\vec{r}) \quad (2.62)$$

şeklinde seriye açılır (A altı valans bandının sınıfı, B de geri kalan bandların sınıfıdır). İlk toplamdaki fonksiyonlar (2.48), (2.49), (2.51), (2.52), (2.54), (2.55) ile verilir.

$$\begin{aligned}
U_{10}(\vec{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X+iY)\uparrow\rangle \\
U_{20}(\vec{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X+iY)\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\uparrow\rangle \\
U_{30}(\vec{r}) &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X-iY)\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\downarrow\rangle \\
U_{40}(\vec{r}) &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X-iY)\downarrow\rangle \\
U_{50}(\vec{r}) &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY)\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |Z\uparrow\rangle \\
U_{60}(\vec{r}) &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X-iY)\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |Z\downarrow\rangle
\end{aligned}$$

Bu fonksiyonlar

$$H(k=0)U_{j0}(\vec{r}) = E_j(0)U_{j0}(\vec{r}) \quad (2.63)$$

denklemini sağlarlar. (2.47), (2.50) ve (2.53)'ten bu enerji değerlerinin şu şekilde verileceği görülebilir;

$$E_j(0) = 0 \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (2.64)$$

$$E_j(0) = -\Delta \quad j = 5, 6 \quad (2.65)$$

Löwdin pertürbasyon yönteminde daha önce çözülen

$$\sum_{j'}^A (H_{jj'}^A - E\delta_{jj'}) a_{j'}(\vec{k}) = 0 \quad (2.66)$$

özdeğer denklemi yerine

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'}^A - E\delta_{jj'}) a_{j'}(\vec{k}) = 0 \quad (2.67)$$

özdeğer denklemi çözülür. Buradaki fark, bu seferki özdeğer denkleminde diğer bandların etkisinin de hesaba katılmasındadır. Burada

$$U_{jj'}^A = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H_{j\gamma} H_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H'_{j\gamma} H'_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} \quad (2.68)$$

$$H_{jj'} = \langle U_{j0} | H | U_{j'0} \rangle = \left[E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} \quad (j, j' \in A) \quad (2.69)$$

$$H'_{j\gamma} = \left\langle U_{j0} \left| \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{\Pi} \right| U_{\gamma 0} \right\rangle \cong \sum_{\alpha} \frac{\hbar k_{\alpha}}{m_0} p_{j\gamma}^{\alpha} \quad (j \in A, \gamma \notin A) \quad (2.70)$$

dır. Ayrıca $j, j' \in A$ için $\Pi_{jj'} = 0$ ve $j \in A, \gamma \notin A$ için $\Pi_{j\gamma}^\alpha = p_{j\gamma}^\alpha$ dir. $\gamma \neq j$ olduğunda, pertürbe olmamış kısım pertürbe kısma $H'_{j\gamma}$ eklendiğinde sonuçları etkilemez, yani, $H_{j\gamma} = H'_{j\gamma}$. Bu nedenle

$$U_{jj'}^A = \left[E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_\alpha k_\beta p_{j\gamma}^\alpha p_{j'\gamma}^\beta}{E_0 - E_\gamma} \quad (2.71)$$

olur. $U_{jj'}^A \equiv D_{jj'}$ denirse, $D_{jj'}$ 'nin matris formu

$$D_{jj'} = E_j(0) \delta_{jj'} + \sum_{\alpha, \beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \quad (2.72)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $D_{jj'}^{\alpha\beta}$

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} \frac{p_{j\gamma}^\alpha p_{j'\gamma}^\beta + p_{j\gamma}^\beta p_{j'\gamma}^\alpha}{m_0 (E_0 - E_\gamma)} \right] \quad (2.73)$$

dir ve tek bant durumundaki (2.15) denkleminde benzerdir (burada $j = j' =$ tek bant indisi n yazılırsa). Yani, burada (2.15) denklemi dejenere bantları içerecek şekilde genelleştirilmiş oldu.

$D_{jj'}$ matris elemanlarını açıkça yazmak için,

$$A_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^x p_{\gamma x}^x}{E_0 - E_\gamma} \quad (2.74)$$

$$B_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^y p_{\gamma x}^y}{E_0 - E_\gamma} \quad (2.75)$$

$$C_0 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^x p_{\gamma y}^y + p_{x\gamma}^y p_{\gamma y}^x}{E_0 - E_\gamma} \quad (2.76)$$

tanımlanır ve γ_1 , γ_2 ve γ_3 band yapısı parametreleri (Luttinger parametreleri) yukarıdakiler cinsinden

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 = \frac{1}{3} (A_0 + 2B_0) \quad (2.77)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 = \frac{1}{6} (A_0 - B_0) \quad (2.78)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 = \frac{C_0}{6} \quad (2.79)$$

şeklinde yazılabilir.

Luttinger-Kohn Hamiltoniyeni (2.63) denklemindeki baz fonksiyonları kullanarak, ($\bar{U}^A \equiv \bar{D}$ yerine \bar{H}^{LK} yazılırsa)

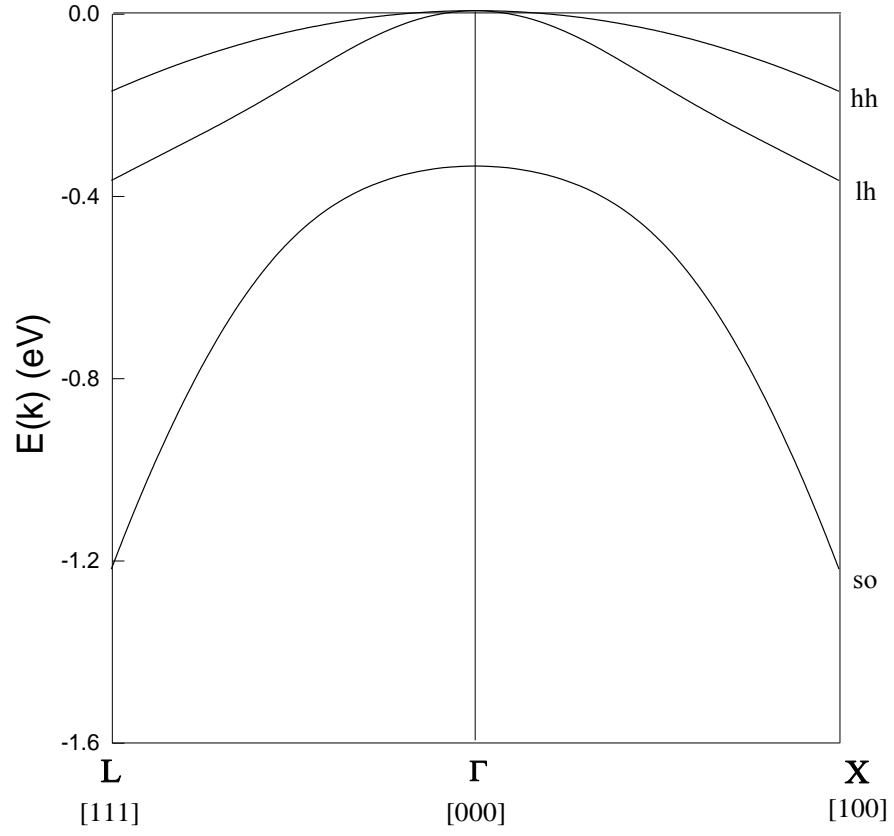
$$\bar{H}^{LK} = - \begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -S/\sqrt{2} & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}S \\ R^+ & 0 & P-Q & S & \sqrt{3/2}S^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & -S^+/\sqrt{2} \\ -S^+/\sqrt{2} & -\sqrt{2}Q^+ & \sqrt{3/2}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{3/2}S^+ & \sqrt{2}Q^+ & -S/\sqrt{2} & 0 & P+\Delta \end{pmatrix} \quad (2.80)$$

elde edilir. Burada

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\sqrt{3} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3} \gamma_3 k_x k_y \right] \\ S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z \end{aligned} \quad (2.81)$$

dır ve matristeki + üst indis Hermit eşlenik anlamı taşır.

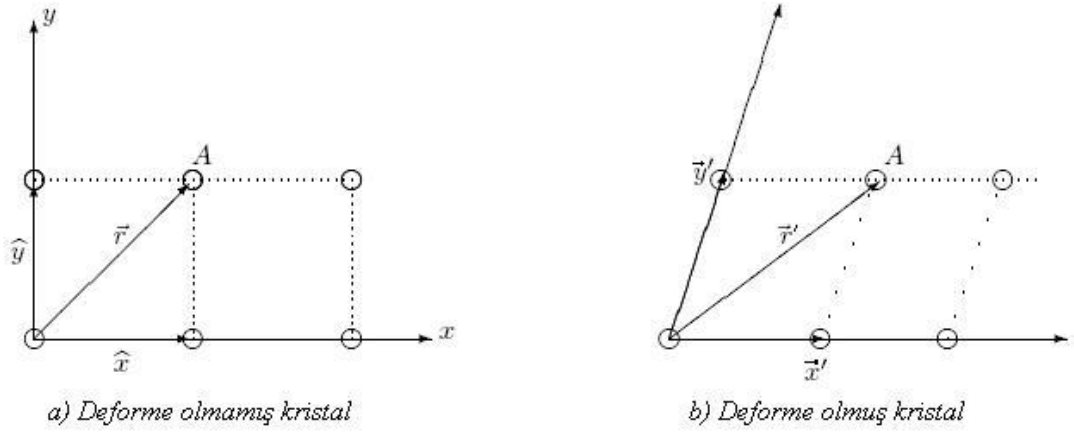
Sonuç olarak ele alınan üç valans bandının enerjileri ve öz fonksiyonları (2.80) ile ifade edilen matris kullanılarak bulunur. Luttinger-Kohn modeline göre GaAs yarıiletken külçe malzemenin valans bant diyagramı Şekil 2.2.'deki gibi elde edilir.



Şekil 2.2. Luttinger-Kohn modeline (6x6'lık matris) göre GaAs külçe yarıiletkeninin valans bandı yapısı

3. ZORLANMANIN KÜLÇE YARIİLETKENİN BAND YAPISINA ETKİSİ

Zorlanma etkisindeki bir yarıiletken kristal bu zorlanma sonucunda düzgün ve küçük bir deformasyona maruz kalıyorsa periyodik yapısı bozulmayabilir. Bu durumda, deforme olmuş kristal eski (deforme olmamış) halinden farklı bir periyoda sahip olur. Yapı yine periyodik olduğundan Bloch teoremi geçerlidir ve yapının yeni Bloch fonksiyonları, pertürbasyon teorisi kullanılarak deforme olmamış halinin Bloch fonksiyonları cinsinden yazılmaya çalışılır.



Şekil 3.1. (a) Deforme olmamış kristaldeki A atomu için \vec{r} konum vektörü. (b) Deforme olmuş kristaldeki A atomu için \vec{r}' konum vektörü

Şekil 3.1.'de görülen deforme olmamış kristaldeki A atomunun yeri

$$\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (3.1)$$

ile verilirken aynı atomun yeri deforme olmuş kristaldeki yeni baz vektörleri ile

$$\vec{r}' = x'\hat{x}' + y'\hat{y}' + z'\hat{z}' \quad (3.2)$$

ya da eski baz vektörleri ile

$$\vec{r}' = x'\hat{x} + y'\hat{y} + z'\hat{z} \quad (3.3)$$

ile verilir. Deforme olmuş kristal ile deforme olmamış kristal arasında

$$\begin{aligned} \hat{x}' &= \hat{x} + \varepsilon_{xx}\hat{x} + \varepsilon_{xy}\hat{y} + \varepsilon_{xz}\hat{z} \\ \hat{y}' &= \hat{y} + \varepsilon_{yx}\hat{x} + \varepsilon_{yy}\hat{y} + \varepsilon_{yz}\hat{z} \\ \hat{z}' &= \hat{z} + \varepsilon_{zx}\hat{x} + \varepsilon_{zy}\hat{y} + \varepsilon_{zz}\hat{z} \end{aligned} \quad (3.4)$$

ilişkisi vardır (deforme olmuş ve olmamış kristaldeki vektör bileşenlerinin her ikisi de deforme olmamış kristalin bazındadır). Bu ilişki matris formunda

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

şeklinde yazılabilir. Ya da $r_1 = x$, $r_2 = y$, $r_3 = z$ olmak üzere,

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= (1 + \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r} \\ r_i' &= r_i + \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} r_j \end{aligned} \quad (3.6)$$

Deforme olmamış kristal ile deforme olmuş kristal arasında da

$$\begin{aligned} x &= x' - \varepsilon_{xx} x' - \varepsilon_{xy} y' - \varepsilon_{xz} z' \\ y &= y' - \varepsilon_{yx} x' - \varepsilon_{yy} y' - \varepsilon_{yz} z' \\ z &= z' - \varepsilon_{zx} x' - \varepsilon_{zy} y' - \varepsilon_{zz} z' \end{aligned} \quad (3.7)$$

ilişkisi vardır. Bu ilişki matris formunda

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

şeklinde yazılabilir. Ya da (3.6)'da olduğu gibi,

$$\begin{aligned} \vec{r} &= (1 - \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r}' \\ r_i &= r_i' - \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} r_j' \end{aligned} \quad (3.9)$$

şeklinde kapalı formda yazılabilir. Deforme olmuş sistem için Schrödinger denklemi,

$$\left[\frac{p'^2}{2m_0} + V(\vec{r}') \right] \psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}') = E_n(\vec{k}') \psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}') \quad (3.10)$$

şeklinde yazılır. Deforme olmuş kristalin potansiyeli ($V(\vec{r}')$) hala periyodiktir ama periyodu, deforme olmamış kristalinkinden ($V_0(\vec{r})$) farklıdır.

Bundan sonraki amaç, (3.10)'daki nicelikleri deforme olmamış kristalin nicelikleri cinsinden yazarak, (3.10)'u deforme olmamış sistemin pertürbe edilmiş hali olarak düşünülüp düşünilemeyeceğini görmektir.

(3.10)'da, deforme olmamış kristalin nicelikleri cinsinden yazılacak nicelikler,

- $p' \rightarrow -i\hbar\nabla'$ momentum operatörü $p \rightarrow -i\hbar\nabla$ cinsinden
- $V(\vec{r}')$ potansiyelini $V_0(\vec{r})$ cinsinden

- $\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}')$ Bloch fonksiyonunu $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ cinsinden

şeklinde sıralanabilir.

$$p' \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i'}$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial x}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial y'} = \frac{\partial x}{\partial y'} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y'} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial y'} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial z'} = \frac{\partial x}{\partial z'} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial z'} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial z'} \frac{\partial}{\partial z}$$

Bu ifadelerde (3.7) denklemi kullanılarak

$$\frac{\partial}{\partial x'} = (1 - \varepsilon_{xx}) \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon_{yx} \frac{\partial}{\partial y} - \varepsilon_{zx} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial y'} = -\varepsilon_{xy} \frac{\partial}{\partial x} + (1 - \varepsilon_{yy}) \frac{\partial}{\partial y} - \varepsilon_{zy} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial z'} = -\varepsilon_{xz} \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon_{yz} \frac{\partial}{\partial y} + (1 - \varepsilon_{zz}) \frac{\partial}{\partial z}$$

bulunur.

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon_{xx} \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon_{yx} \frac{\partial}{\partial y} - \varepsilon_{zx} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial y'} = \frac{\partial}{\partial y} - \varepsilon_{xy} \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon_{yy} \frac{\partial}{\partial y} - \varepsilon_{zy} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial z'} = \frac{\partial}{\partial z} - \varepsilon_{xz} \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon_{yz} \frac{\partial}{\partial y} - \varepsilon_{zz} \frac{\partial}{\partial z}$$

Bunlar kompakt formda şu şekilde yazılabilir;

$$\frac{\partial}{\partial r_i'} = \sum_j \frac{\partial r_j}{\partial r_i'} \frac{\partial}{\partial r_j} = \frac{\partial}{\partial r_i} - \sum_j \varepsilon_{ji} \frac{\partial}{\partial r_j} \quad (3.11)$$

Sistemdeki deformasyon homojen bir zorlanma sonucu oluşuyorsa $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ olacaktır.

Bu durumda

$$\vec{p}' = \vec{p} \cdot (1 - \vec{\varepsilon}) \quad (3.12)$$

yazılabilir.

$$p_i' = p_i - \sum_j \varepsilon_{ji} p_j \quad (3.13)$$

$$(p_i')^2 = \left(p_i - \sum_j \varepsilon_{ji} p_j \right) \left(p_i - \sum_j \varepsilon_{ji} p_j \right)$$

$$(p_i')^2 = p_i^2 - 2 \sum_j p_i \varepsilon_{ji} p_j$$

ε_{ij} küçük olduğundan iki ve daha büyük mertebeli terimler ihmal edilir. $(p')^2 = \sum_i p_i'^2$

ve $\bar{\varepsilon}$ matrisinin simetrik olduğu kullanılırsa,

$$(p')^2 = p^2 - 2 \sum_{i,j} p_i \varepsilon_{ij} p_j \quad (3.14)$$

elde edilir. Böylece deforme olmuş kristaldeki momentumlar, deforme olmamış kristalin momentumları cinsinden elde edilmiş olur.

Deforme olmuş kristalin periyodik potansiyeli $V(\vec{r}')$

$$V(\vec{r}') = V\left[(1 + \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r}\right] = V_0(\vec{r}) + \sum_{i,j} V_{ij} \varepsilon_{ij} \quad (3.15)$$

şeklinde seriye açılabilir. ε_{ij} küçük olduğu için seri açılımında daha yüksek mertebeden terimleri hesaba katmaya gerek yoktur. V_{ij}

$$V_{ij} = \left. \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{ij}} \right|_{\varepsilon_{ij} \rightarrow 0}$$

Deforme olmuş kristaldeki Bloch fonksiyonu $\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}')$ için de

$$\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}') = \psi_{n\vec{k}'}\left[(1 + \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r}\right] = e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} u_{n\vec{k}'}(\vec{r}')$$

$$= e^{i\vec{k}' \cdot (1 + \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}'}((1 + \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r})$$

yazılabilir. \vec{k}' ters uzunluk boyutunda bir vektör olduğundan, deforme olmamış sistemden deforme olmuş sisteme dönüşümü

$$\vec{k}' = \frac{1}{(1 + \bar{\varepsilon})} \vec{k}$$

şeklinde olur [$k' = \frac{2\pi}{\lambda'}$ ve $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ olarak düşünülürse deforme olmuş sistemin uzunluk

niceliği ile deforme olmamış sistemin uzunluk niceliği arasındaki ilişki $\lambda' = \lambda(1 + \bar{\varepsilon})$

olur. Buradan $\frac{k'}{k} = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{1}{(1 + \bar{\varepsilon})}$ olur.]. Dolayısıyla,

$$\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}') = e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} u_{n\vec{k}'}^S(\vec{r}) \quad (3.16)$$

olur. Burada $u_{n\vec{k}'}^S(\vec{r}) = u_{n\vec{k}'}\left[(1 + \bar{\varepsilon}) \cdot \vec{r}\right]$ dir.

Tüm bu dönüşümlerden sonra (3.14), (3.15) ve (3.16) nın (3.10)'da yazılmasıyla, deforme olmuş kristal için Schrödinger denklemi şu hale gelir;

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(p^2 - 2 \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta} p_\beta \right) + \left(V_0(\vec{r}) + \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \right) \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = E_n(\vec{k}') u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})$$

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\vec{r}) + \left(-\frac{1}{m_0} \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha p_\beta + \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta} \right) \varepsilon_{\alpha\beta} \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = E_n(\vec{k}') u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})$$

Daha sonra

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\vec{r}) \quad (3.17)$$

$$H_\varepsilon = \sum_{\alpha,\beta} \left(-\frac{1}{m_0} p_\alpha p_\beta + V_{\alpha\beta} \right) \varepsilon_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha,\beta} D^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \quad (3.18)$$

tanımlanmasıyla deforme olmuş kristal için Schrödinger denklemi

$$[H_0 + H_\varepsilon] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = E_n(\vec{k}') u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) \quad (3.19)$$

haline gelir. (3.19)'daki $H_0 [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})]$ ve $H_\varepsilon [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})]$ terimleri, Hamiltoniyenin içerdiği operatörlerin köşeli parantez içindeki fonksiyona etki ettirilmesiyle açılıp her iki taraftan $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ terimleri sadeleştirildiğinde, $u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})$ için Schrödinger denklemi elde edilmiş olur. Daha önce $H_0 [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})]$ terimi hesaplanmış ve

$$H_0 [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})] = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) \quad (3.20)$$

olarak bulunmuştu. Aynı yolla $H_\varepsilon [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})]$ terimi de hesaplanırsa,

$$H_\varepsilon [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})] = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(H_\varepsilon - \frac{2\hbar}{m_0} \sum_{\alpha,\beta} k_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta} p_\beta \right) u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) \quad (3.21)$$

bulunur. (3.19), (3.20) ve (3.21)'den

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + H_\varepsilon - \frac{2\hbar}{m_0} \sum_{\alpha,\beta} k_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta} p_\beta \right) u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = E_n(\vec{k}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})$$

$$\left(H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + H_\varepsilon - \frac{2\hbar}{m_0} \sum_{\alpha,\beta} k_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta} p_\beta \right) u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = \left(E_n(\vec{k}') - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})$$

elde edilir. Bu son denklem

$$(H_0 + H') u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) \quad (3.22)$$

şeklinde yazılabilir. (3.22) $u_{n\vec{k}}^S(\vec{r})$ için Schrödinger denklemidir. Denklemdaki terimler,

$$H' = H_k + H_\varepsilon + H_{\varepsilon k} \quad (3.23)$$

$$H_k = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad (3.24)$$

$$H_\varepsilon = \sum_{\alpha, \beta} D^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \quad (3.25)$$

$$H_{\varepsilon k} = -\frac{2\hbar}{m_0} \sum_{\alpha, \beta} k_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta} p_\beta \quad (3.26)$$

(3.22)'den görüldüğü gibi, zorlanma etkisinde deforme olmuş sistem, deforme olmamış sistemin pertürbe edilmiş hali olarak göz önüne alınabilir. H_k pertürbasyon terimi birinci mertebeden katkı getirmez (pariteden dolayı ihmal edilir $(H_k)_{nn} = 0$). Bundan dolayı \vec{k} 'ya bağlı terimlerde ikinci dereceden, $\varepsilon_{\alpha\beta}$ 'ya bağlı terimlerde de birinci dereceden pertürbasyon katkısına bakılır.

3.1. Tek Bant Durumu

Basit bir örnek olarak iletkenlik bandı durumu ele alınabilir. Tek bant için pertürbasyon teorisi kullanılırsa;

$$\begin{aligned} u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) &\approx u_{n0}(\vec{r}) \\ H_0 u_{n0}(\vec{r}) &= E_n(0) u_{n0}(\vec{r}) \\ E &= E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + (H_\varepsilon)_{nn} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{p})_{nn'}}{E_n - E_{n'}} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{p})_{n'n}}{E_n - E_{n'}} \\ &+ \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{p})_{nn'}}{E_n - E_{n'}} (H_\varepsilon)_{n'n} + (H_\varepsilon)_{nn'} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{p})_{n'n}}{E_n - E_{n'}} \\ &= E_n(0) + (H_\varepsilon)_{nn} + \sum_{\alpha, \beta} D^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \end{aligned} \quad (3.27)$$

elde edilir. Burada $D^{\alpha\beta}$ daha önceden tanımlanan ters etkin kütle operatörünün benzeridir. Ayrıca pertürbasyon teorisindeki terimi

$$\sum_{n' \neq n} \frac{H'_{nn'} H'_{n'n}}{E_n - E_{n'}}$$

şeklinde kullandık. Burada $H' = (\hbar/m_0) \vec{k} \cdot \vec{p} + H_\varepsilon + H_{\varepsilon k}$ ile verilir ve ilk terim dışındaki terimlerin katkısı pariteden dolayı sıfır olur. Bundan dolayı \vec{k} 'ya bağlı olanları ikinci

dereceden, ε 'na bağlı olanları birinci dereceden pertürbasyon katkılarına bakılır. İletkenlik bandının izotropik doğasından dolayı diagonal $\langle n|H_\varepsilon|n \rangle$ terimi

$$\langle n|H_\varepsilon|n \rangle = a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (3.28)$$

olur. Örneğin, $\alpha \neq \beta$ için $\langle S|\hat{D}^{\alpha\beta}|S \rangle = 0$ dir. Bu yüzden zorlanma altındaki tek bandın (iletkenlik bandı) dağılımı bağıntısı

$$E = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (3.29)$$

şeklindedir. Burada a_c iletkenlik bandı için deformasyon potansiyelidir ve $u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = u_{n0}(\vec{r})$ dir. Zorlanmanın iletkenlik bandı üzerinde (birinci dereceden zorlanma pertürbasyonu etkisiyle) tek etkisi, iletkenlik bant kenarının bir miktar ($a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$ kadar) kaymasıdır.

3.2. Dejenere Bantlar Durumu

Genel olarak

$$u_{n\vec{k}}^S(\vec{r}) = \sum_j^A a_j(\vec{k}) u_{j0}(\vec{r}) + \sum_\gamma^B a_\gamma(\vec{k}) u_{\gamma 0}(\vec{r}) \quad (3.30)$$

olduğu kabul edilir. Burada A sınıfı ilgilendiğimiz bantları içerir. Örneğin, A sınıfı bantları dejenere olan valans bantları (iki ağır boşluk, iki hafif boşluk ve iki spin yörünge bantları) olarak alınır. B sınıfı da, A sınıfı bantlarının dışında kalan bantları içerir. Löwdin pertürbasyon metodunu kullanırsak,

$$U_{jj'}^A = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq jj'}^B \frac{H'_{j\gamma} H'_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} \quad (3.31)$$

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'}^A - E \delta_{jj'}) a_{j'}(\vec{k}) = 0 \quad (3.32)$$

$$U_{jj'}^A = \underbrace{\delta_{jj'} E_j(0) + \sum_{\alpha,\beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta}_{H_{jj'}^{LK} \text{ unstrained}} + \underbrace{\sum_{\alpha,\beta} \hat{D}_{jj'}^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}}_{(H_\varepsilon)_{jj'} \text{ linear strain}} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_\gamma^B \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_{j\gamma} (H_\varepsilon)_{\gamma j'} + (H_\varepsilon)_{j\gamma} \vec{k} \cdot \vec{p}_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} \quad (3.33)$$

veya

$$H = H^{LK} + H_\varepsilon$$

elde edilir. Elmas yapısındaki kristaller için yukarıdaki son terim ihmal edilir. Ya $p_{j\gamma}$ ya da $(H_\varepsilon)_{\gamma j}$ dönme simetrisinden (center of inversion) dolayı sıfır olur. Bu yüzden yukarıdaki ikinci terim ihmal edilir. Dönme simetrisine sahip olmayan bazı kristaller için bu terim sıfır değildir. Bunun anlamı k uzayındaki bir ekstremum noktası deformasyon nedeniyle kaydırılabilir. Bununla birlikte bu terim çoğu III-V bileşikleri için ihmal edilebilir. Üçüncü terim, zorlanma nedeniyle $k_\alpha k_\beta \leftrightarrow \varepsilon_{\alpha\beta}$ 'ya benzeterek açılabilir. Bu nedenle diğer terimler içinde benzer bir eşleşmeyle,

$$\frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} \leftrightarrow D_v^d = -a_v \quad (3.34)$$

$$\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \leftrightarrow \frac{D_u}{3} = -\frac{b}{2} \quad (3.35)$$

$$\frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \leftrightarrow \frac{D'_u}{3} = -\frac{d}{2\sqrt{3}} \quad (3.36)$$

yazılabilir. Burada a_v , b , d "Pikus-Bir" deformasyon potansiyelleridir ve D_v^d , D_u ve D'_u $\hat{D}_{ij}^{\alpha\beta}$ 'nin farklı bileşenleridir. Sistemin Hamiltonianı matris formunda

$$\overline{H} = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^+ & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{array}{l} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{array} \quad (3.37)$$

ile verilir. Burada

$$P = P_k + P_\varepsilon \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon$$

$$R = R_k + R_\varepsilon \quad S = S_k + S_\varepsilon$$

$$P_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$\begin{aligned}
Q_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\
R_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} \left(-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y \right) \\
S_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y) k_z \\
P_\varepsilon &= -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & Q_\varepsilon &= -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \\
R_\varepsilon &= \sqrt{\frac{3}{2}} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} & S_\varepsilon &= -d (\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz})
\end{aligned}$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada ε_{ij} simetrik zorlanma tensörüdür (strain tensor) ve çeşitli baskı durumlarına göre zorlanma tensörünün bileşenlerinin hesabı **EK-2**'de verilmiştir; γ_1, γ_2 ve γ_3 Luttinger ters kütle parametreleri; Δ ise spin yörünge etkileşme enerjisidir (split-off energy). $|j, m\rangle$ baz fonksiyonları bölge merkezindeki Bloch fonksiyonlarını temsil ederler ve daha önce tanımlanmışlardı. Ayrıca burada zorlanma yok iken valans bandının tepesi sıfır enerjili nokta olarak alınmıştır. Yukarıdaki Hamiltonian, zorlanmanın yarıiletkenlerin bant yapısına etkisini konu alan çalışmalarda çoğunlukla kullanılır.

3.3. Külçe Yarıiletkenin Valans Bandı Yapısı

Çoğu III-V yarıiletkenlerde spin yörünge bantları, HH ve LH bantlarının birkaç yüz meV (\sim GaAs için 340 meV) altında yer alır. İlgilenilen enerji aralığı sadece ondalık basamağında (yani, 10, 20 meV gibi) ise, genellikle spin yörünge bantları ihmal edilir. O zaman denklem (3.37) ile verilen Hamiltonian 4x4'lük olur ve

$$\bar{\bar{H}} = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^+ & P-Q & 0 & R \\ R^+ & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q \end{bmatrix} \begin{matrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \end{matrix} \quad (3.38)$$

şeklini alır.

Basit olması açısından “biaxial strain” (iki eksenli zorlanma) göz önüne alınırsa, bu durumda

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \quad \Rightarrow \quad R_\varepsilon = S_\varepsilon = 0 \end{aligned}$$

olur. Bu durum aşağıdaki önemli sistemlerde görülür.

1. (001) doğrultusuna konulmuş alt taş (substrate) üzerine “pseudomorphically” olarak büyütülmüş ve zorlanmış tabakalı yarıiletkenlerde.

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a}$$

(a tabakanın örgü sabiti ve a_0 alt taşın örgü sabiti olmak üzere)

2. z doğrultusunda bir dış tek eksenli zorlanma altındaki külçe yarıiletkenlerde.

Baskı tensörü (\bar{T}) zorlanmaya (strain) elastik sıkışma tensörü (elastic stiffness tensor) ile bağlıdır.

$$\begin{bmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \\ T_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

İki eksenli zorlanma için $T_{xy} = T_{yz} = T_{zx} = 0$ bulunur (“biaxial strain” durumunda $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0$ olduğu için). Ayrıca z doğrultusunda baskı da olmadığından,

$$0 = T_{zz} = C_{12}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + C_{11}\varepsilon_{zz} \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\varepsilon_{xx}$$

elde edilir. (“Strain” in birim yer değiştirmeye; “stress” in ise basınç ya da kuvvete karşılık geldiği düşünülebilir. İkisi arasındaki ilişki “elastic stiffness” tensör ile sağlanır.)

Eğer biz dış bir tek eksenli baskı P 'yi z eksenini boyunca uygularsak

$$T_{zz} = P \quad T_{xx} = T_{yy} = 0$$

olur. Bundan dolayı da,

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = -\frac{C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \cdot P$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \cdot P$$

şeklinde zorlanma tensör elemanları P (stress)'ye bağlı olarak bulunur. Burada P negatif ise, malzeme z eksenini doğrultusunda sıkıştırılıyor (yani, basınç uygulanıyor demektir) ve xy düzleminde geriliyor. Eğer P pozitif ise, o zaman da malzeme z eksenini doğrultusunda geriliyor ve xy düzleminde sıkıştırılıyor demektir.

İki eksenli zorlanma (biaxial strain) altındaki bir yarıiletkenin bölge merkezinde ($\vec{k} = 0$) HH ve LH bant kenarı enerjileri

$$E_{HH}(\vec{k} = 0) = -P_\varepsilon - Q_\varepsilon = a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3.40)$$

$$E_{LH}(\vec{k} = 0) = -P_\varepsilon + Q_\varepsilon = a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3.41)$$

$$E_C(\vec{k} = 0) = E_g + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (\text{İletkenlik bandı bant kenarı enerjisi})$$

olur. O zaman bant kenarı geçiş enerjileri $a \triangleq a_c - a_v$ (hidrostatik deformasyon potansiyeli) olmak üzere,

$$E_{C-HH}(\vec{k} = 0) = E_g + a (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3.42)$$

$$E_{C-LH}(\vec{k} = 0) = E_g + a (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3.43)$$

Dikkat edilirse b katsayısının önündeki işaretler HH ve LH bantlarının potansiyellerinden dolayı değişti. Burada E_g zorlanma olmadan önceki yasak enerji aralığıdır. Bazen literatürde hidrostatik (δE_{hy}) ve "shear" (δE_{sh}) deformasyon enerjileri kullanılır. Bunlar

$$\delta E_{hy} = -a (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (3.44)$$

$$-\frac{1}{2} \delta E_{hy} = Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3.45)$$

şeklinde dir. Geçiş enerjilerini tekrar yazılırsa,

$$E_{C-HH} = E_g - \delta E_{hy} + \frac{1}{2} \delta E_{sh} \quad (3.46)$$

$$E_{C-LH} = E_g - \delta E_{hy} - \frac{1}{2} \delta E_{sh} \quad (3.47)$$

elde edilir.

Bu bölümün başında külçe yarıiletkenin valans bant yapısını tanımlayan 4x4'lük Hamiltonian kullanılarak

$$\det[H_{ij}(\vec{k}) - \delta_{ij}E] = 0 \quad (3.48)$$

denklemini çözülürse, HH ve LH için dağılım eğrileri

$$E_{HH}(\vec{k}) = -P_\varepsilon - P_k - \text{sgn}(Q_\varepsilon) \sqrt{(Q_\varepsilon + Q_k)^2 + |R_k|^2 + |S_k|^2} \quad (3.49)$$

$$E_{LH}(\vec{k}) = -P_\varepsilon - P_k + \text{sgn}(Q_\varepsilon) \sqrt{(Q_\varepsilon + Q_k)^2 + |R_k|^2 + |S_k|^2} \quad (3.50)$$

elde edilir. Buradaki her çözüm çift katlı dejeneredir. Q_ε ya pozitif (“compressive strain” yani zorlanma baskı veya basınç şeklinde) ya da negatif (“tensile strain” yani zorlanma germe veya gerilme şeklinde) olabileceğinden karekökün önünde sgn faktörü vardır ($Q_\varepsilon > 0$ için $\text{sgn}(Q_\varepsilon) = +1$ ve $Q_\varepsilon < 0$ için $\text{sgn}(Q_\varepsilon) = -1$ olur.). \vec{k} sifıra yaklaşırken (3.49) ve (3.50) denklemleriyle (3.40) ve (3.41) denklemleri yeniden elde edilir.

Denklem (3.49) ve (3.50)'nin analitik çözülmesiyle büyütme doğrultusu k_z ve düzleme paralel doğrultu k_x boyunca HH ve LH için enerji dağılımı bağıntısı elde edilebilir. Paralel düzlem boyunca (yani, k_x doğrultusunda ($k_y = k_z = 0$)), $Q_\varepsilon < 0$ (biaxial compression) için ve sonlu k_x için (3.49)'dan

$$E_{HH}(k_x) = -P_\varepsilon - \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} k_x^2 + \left[\left(Q_\varepsilon + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} k_x^2 \right)^2 + 3 \left(\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \right)^2 k_x^4 \right]^{1/2} \quad (3.51)$$

ve (3.50)'den de

$$E_{LH}(k_x) = -P_\varepsilon - \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} k_x^2 - \left[\left(Q_\varepsilon + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} k_x^2 \right)^2 + 3 \left(\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \right)^2 k_x^4 \right]^{1/2} \quad (3.52)$$

elde edilir. “Biaxial tension” durumu ($Q_\varepsilon > 0$) için ise,

$$E_{HH}(k_x) = -P_\varepsilon - \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} k_x^2 - \left[\left(Q_\varepsilon + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} k_x^2 \right)^2 + 3 \left(\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \right)^2 k_x^4 \right]^{1/2} \quad (3.53)$$

$$E_{LH}(k_x) = -P_\varepsilon - \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} k_x^2 + \left[\left(Q_\varepsilon + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} k_x^2 \right)^2 + 3 \left(\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \right)^2 k_x^4 \right]^{1/2} \quad (3.54)$$

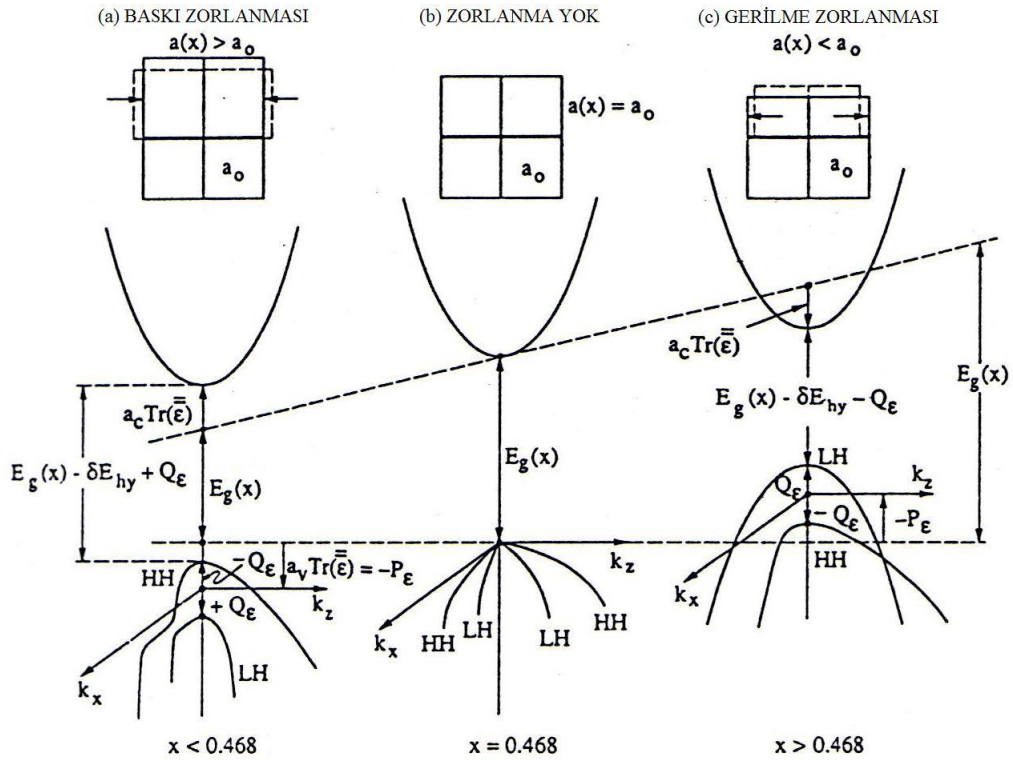
elde edilir.

k_z doğrultusu boyunca hem “compression” hem de “tension” için

$$E_{HH}(k_z) = -P_\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 - Q_\varepsilon \quad (3.55)$$

$$E_{LH}(k_z) = -P_\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 + Q_\varepsilon \quad (3.56)$$

elde edilir. Bu denklemleri kullanarak InP üzerine büyütülen $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ külçe yarıiletkeninde hem baskı zorlanması (compression) hem de gerilme zorlanması (tension) için valans bant yapısı, yani E_{HH} ve E_{LH} in k_x ve k_z 'ye karşı değişimi Şekil 3.2.'deki gibidir.



Şekil 3.2. Külçe $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ yarıiletkeninin farklı Ga mol oranları (x) için momentum uzayındaki enerji bant yapısının şekli [39]. (a) İki eksenli baskı (biaxial compression) durumu (b) Zorlanmanın olmadığı durum (c) İki eksenli gerilme (biaxial tension) durumu.

Spin Yörünge Etkileşimini İçeren Durum: $\vec{k} = 0$ da 6×6 'lık Hamiltonian

$$\bar{H}(\vec{k} = 0) = - \begin{bmatrix} P_\varepsilon + Q_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & 0 & -\sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & 0 & \sqrt{2}Q_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & P_\varepsilon + Q_\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 & 0 & P_\varepsilon + \Delta & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 & 0 & P_\varepsilon + \Delta \end{bmatrix} \quad (3.57)$$

şekline dönüşür. HH bandının diğer bantlarla çiftlenimi yoktur. Ama LH ve SO bantları çiftlenimlidir (tümü $\vec{k} = 0$ da). Çiftlenimin sonucu olarak $E(0)$ ($E_{LH}(0)$ veya $E_{SO}(0)$) enerjisine karşılık gelen öz vektörler

$$\begin{bmatrix} -P_\varepsilon + Q_\varepsilon & \pm\sqrt{2}Q_\varepsilon \\ \pm\sqrt{2}Q_\varepsilon & -P_\varepsilon - \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}} \\ F_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}} \end{bmatrix} = E(0) \begin{bmatrix} F_{\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}} \\ F_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \quad (3.58)$$

$$\left| F_{\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}} \right|^2 + \left| F_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}} \right|^2 = 1 \quad (3.59)$$

eşitlikleri ile bulunabilir. Bunlar birbirine karışmayan LH veya SO durumları değildir, yani saf durumlar değildir. Zorlanma nedeniyle bu durumların karışımıdır. Yukarıdaki 6x6'lık Hamiltonian kullanılarak bant kenarı enerjileri

$$E_{HH}(0) = -P_\varepsilon - Q_\varepsilon \quad (3.60)$$

$$E_{LH}(0) = -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \quad (3.61)$$

$$E_{SO}(0) = -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta - \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \quad (3.62)$$

şeklinde bulunur.

4. ETKİN KÜTLE YAKLAŞIMI (ZARF FONKSİYONU YAKLAŞIMI)

Bu bölümde hem tek bant hem de dejenere bantlar için yarıiletkenlerde etkin kütle teorisinin kısa bir özeti yapılmıştır.

Bu yaklaşım ile heteroyapılarda öz durumların hesaplanması amaçlanmaktadır. Burada, öz durumlar oluşturulurken külçe materyallerinin dağılım bağıntısı esas alınır. Külçe materyallerin dağılım bağıntısı ise, Kane modeli ya da Luttinger-Kohn modeli ile elde edilir. Son zamanlarda yapılan çalışmalarda parabolik olmayan etkileri hesaba katmak için genellikle Luttinger-Kohn modeli kullanılır.

Zarf fonksiyonu yaklaşımında külçe Brillouin bölgesinin yüksek simetri nokta merkezleri (Γ , X, L) esas alınır. Birçok yarıiletkenin elektronik özelliklerini belirleyen iletim bandının alt ve valans bandının üst elektronik durumları olduğu için, ayrıntılı hesaplara gerek duymaksızın lokal bir dağılım bağıntısı ile heteroyapının elektronik yapısı oluşturulabilir.

4.1. Dejenere Olmayan Tek Bant

Tek bant için etkin kütle teorisinin (EMT) en önemli sonucu aşağıdaki gibidir; Eğer $\vec{k} = 0$ civarındaki bir n bandı için enerji dağılım eşitliği aşağıdaki gibi verilirse,

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \sum_{\alpha, \beta} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \quad (4.1)$$

ve $V(\vec{r})$ periyodik potansiyele (kristal potansiyele) sahip H_0 Hamiltonianı için

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \quad (4.2)$$

$$H_0 \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.3)$$

yazılır. Dejenere olmayan tek bant durumunda ise, bir $U(\vec{r})$ pertürbasyonuna sahip Schrödinger eşitliğinin çözülmesiyle ilgilenilir. $U(\vec{r})$ pertürbasyonu, safsızlık potansiyele veya kuantum kuyusu potansiyele olabilir.

$$[H_0 + U(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (4.4)$$

(4.4) denklemi

$$\left[\sum_{\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) + U(\vec{r}) \right] F(\vec{r}) = [E - E_n(0)] F(\vec{r}) \quad (4.5)$$

çözülerek elde edilebilir (k_α, k_β operatörlere dönüştü). Dalga fonksiyonu yaklaşık olarak

$$\psi(\vec{r}) = F(\vec{r}) u_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad (4.6)$$

ile verilir. Periyodik potansiyel $V(\vec{r})$, etkin kütle $\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta}$ ve enerji bantlarını belirler.

$U(\vec{r})$ pertürbasyon potansiyeli yarıiletken heteroyapıların (kuantum kuyusu) potansiyeli de olabilir.

$U(\vec{r})$ üzerindeki yaklaşımlar: Yeteri kadar zayıftır, öyle ki, bantlar arasında çakışma olmuyor ve $U(\vec{r})$, \vec{r} ile yavaş değişen bir fonksiyondur.

4.2. Dejenere Bantlar

Dejenere bantlar ve $U(\vec{r})$ pertürbasyon potansiyeli için etkin kütle teorisi aşağıdaki şekilde verilebilir. Eğer bir setin dejenere bantlarının dağılımı bağıntısı

$$H\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.7)$$

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + H_{so} \quad (4.8)$$

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (4.9)$$

denklemlerine uyar ise,

$$\sum_{j=1}^6 H_{jj'}^{LK} a_{j'}(\vec{k}) = \sum_{j=1}^6 \left[E_j(0) \delta_{jj'} + \sum_{\alpha,\beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \right] a_{j'}(\vec{k}) = E(\vec{k}) a_j(\vec{k}) \quad (4.10)$$

ile verilir. O zaman yarıiletken için $\psi(\vec{r})$ çözümü

$$[H + U(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (4.11)$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{j=1}^6 F_j(\vec{r}) u_{j0}(\vec{r}) \quad (4.12)$$

ile verilir. Burada $F_j(\vec{r})$ zarf fonksiyonu

$$\sum_{j'=1}^6 \left[E_j(0) \delta_{jj'} + \sum_{\alpha, \beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) + U(\vec{r}) \delta_{jj'} \right] F_{j'}(\vec{r}) = E F_j(\vec{r}) \quad (4.13)$$

denklemine uyar.

5. YARIİLETKEN KUANTUM KUYULARININ BANT YAPISI

Kuantum kuyuları bir boyutu kuşatılmış olan yapılardır ve bu yapılar farklı malzemeler ile lazer diyodlar gibi yeni optik aletlerin yapımında kullanılır. Kuantum kuyularında valans bandının enerji band dağılımının ve dalga fonksiyonlarının hesaplanması genellikle çok karışıktır ve analitik çözümleri tam olarak yapılamamaktadır.

Burada biz $\vec{k}.\vec{p}$ metodu üzerinde yoğunlaştık ve bu metodla Luttinger-Kohn Hamiltonianının Pikus-Bir zorlanma terimleri ile birlikte çözümünü üzerine çalıştık.

İlk önce etkin kütle teorisinin sonuçları iletkenlik ve valans bandına uygulanırsa;

1) CB (İletkenlik Bandı)

$$\left[\sum_{\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) + U(\vec{r}) \right] F(\vec{r}) = [E - E_n(0)] F(\vec{r}) \quad (5.1)$$

Yukarıdaki toplamda $\alpha = \beta$ ise $\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta}$ diagonaldir ve

$$\psi(\vec{r}) = F(\vec{r}) u_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad (5.2)$$

ile verilir.

2) VB (Valans Bandı)

$$\sum_{j=1}^6 \left[E_j(0) \delta_{jj'} + \sum_{\alpha,\beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) + U(\vec{r}) \delta_{jj'} \right] F_{j'}(\vec{r}) = E.F_j(\vec{r}) \quad (5.3)$$

Burada $D_{jj'}^{\alpha\beta}$ LK Hamiltonianı ile tanımlıdır ve

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{j=1}^6 F_j(\vec{r}) u_{j0}(\vec{r}) \quad (5.4)$$

ile verilir.

5.1. Zorlanmanın Olmadığı Durum

İletkenlik Bandı: İletkenlik bandı için etkin kütle teorisi yardımıyla dağılım bağıntısı

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (5.5)$$

şeklinde verilir. Burada bariyer bölgesinde elektronun etkin kütlesi m_b^* ve kuyu bölgesinde de m_w^* 'dir. İletkenlik bandı için kuantum kuyu potansiyeli,

$$U(z) = \begin{cases} V_0 (= \Delta E_c) & |z| > \frac{L_w}{2} \\ 0 & |z| \leq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (5.6)$$

şeklinde dir. Burada enerji, iletkenlik bandı kenarından itibaren ölçülmüştür.

Tek bant için etkin kütle eşitliği

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar^2}{2m(z)} k_t^2 + U(z)} \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (5.7)$$

Bu form heteroyapının arayüzünde J_z 'nin sürekliliğini sağlamak için kullanıldı.

şeklinde dir. Dalga fonksiyonunu

$$\psi(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_t \cdot \vec{r}}}{\sqrt{A}} \psi(z) \quad (5.8)$$

şeklinde ayırabiliriz. Böylece

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} \psi(z) + U(z) \psi(z) = \left[E(k_t) - \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m(z)} \right] \psi(z) \quad (5.9)$$

elde edilir. Burada $\psi(z)$ 'nin k_t 'ye bağıllığını ihmal ettik (Gerçekte z 'ye bağılıdır ve kuyudaki etkin kütleyle yer değiştirdik.). n 'ci alt bant enerjisi $E_n(0)$ için $k_t = 0$ 'da bu

eşitlik çözüldü. ($\psi(z) = f_n(z)$) Sonuçta $E_n(k_t) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_w^*}$ bulundu.

Valans Bandı: Kuantum kuyusu potansiyeli

$$V(z) = \begin{cases} -\Delta E_v & |z| > \frac{L_w}{2} \\ 0 & |z| \leq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (5.10)$$

$k_t = 0$ 'da Luttinger-Kohn Hamiltonianı (4x4) diagonal olur. Enerji öz değerleri,

$$E_{HH}(k_z) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 \quad (5.11)$$

$$E_{LH}(k_z) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 \quad (5.12)$$

olur. Buradan

$$E_{HH}(k_z) = -\frac{\hbar^2}{2m_{hh}^z} \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (5.13)$$

$$E_{LH}(k_z) = -\frac{\hbar^2}{2m_{lh}^z} \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (5.14)$$

elde edilir. γ_1 ve γ_2 parametreleri bariyer ve kuyuda farklı değerdedir.

$$\left[+\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_{(m)}^z} \frac{\partial}{\partial z} + V_h(z) \right] g_m(z) = E g_m(z) \quad (5.15)$$

Burada m , alt bant indisidir (örneğin, $m \equiv hhm$ veya lhm dir.). Böylece hhm ve lhm alt bantları benzer eşitlikten bulunabilir (Parabolik bant modelleri için). Sadece Luttinger parametrelerini farklı bölgeler için kullanmalıyız. Valans bantlarının dağılımı bağıntısı (4x4 spin yörünge çiftlenimi ihmal edildi)

$$\left[\bar{H}_{LK} \left(k_x, k_y, k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_h(z) \bar{I} \right] \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

şeklinde. LK Hamiltonianı $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ “zarf fonksiyonu” ile Bloch fonksiyonları kullanılarak külçe için elde edildi. Burada ise, z doğrultusundaki kuşatma için k_z ’nin restore edilmesi gerekir. Yani, operatör formuna döndürülmesi gerekir.

$$F_{\vec{k}}(\vec{r}) = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{3/2}(k_x, k_y, z) \\ g_{1/2}(k_x, k_y, z) \\ g_{-1/2}(k_x, k_y, z) \\ g_{-3/2}(k_x, k_y, z) \end{bmatrix} \frac{e^{ik_x x + ik_y y}}{\sqrt{A}} \quad (5.17)$$

zarf fonksiyonu

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = F_1 \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + F_2 \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + F_3 \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + F_4 \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \quad (5.18)$$

HH alt bantları ile LH alt bantları arasındaki çiftlenim bant yapısında eğilmelere neden olur. Valans bandındaki bu “mixing” etkisi HH ve LH dalga fonksiyonunda ortaya çıkar. Bant kenarında $\left| \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2} \right\rangle \rightarrow HH$ ve $\left| \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow LH$ dır.

H^{LK} in diagonalizasyonu

$$\bar{\bar{U}} = \begin{bmatrix} \alpha^* & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & -\beta & \beta^* & 0 \\ 0 & \beta & \beta^* & 0 \\ \alpha^* & 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i[(\theta_S + \theta_R)/2 + \pi/4]}$$

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i[(\theta_S - \theta_R)/2 + \pi/4]}$$

$$R = |R| e^{i\theta_R} \quad S = |S| e^{i\theta_S}$$

olmak üzere bu üniter matris ile $\bar{\bar{H}}^{LK}$ (strain terimlerini de içerebilir)

$$\bar{\bar{U}} \bar{\bar{H}}^{LK} \bar{\bar{U}}^+ = \bar{\bar{H}} = \begin{bmatrix} \boxed{2 \times 2} & \\ & \boxed{2 \times 2} \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

dönüştürülür.

Not: Genelde $k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z}$ olur, yani operatöre dönüşür. Özel durum, dış baskının $P \parallel [100]$, $[001]$, $[110]$ doğrultularında uygulandığında $\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0$ ve θ_S k_z ’den bağımsız olmasıdır. Bu yüzden Hamiltonian doğrudan kuantum kuyusu problemine uygulanabilir.

Dış baskının (P) $[110]$ doğrultusuna uygulanması durumunda kristal uyumsuzluğu nedeniyle elastik zorlanma meydana gelir ve

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}, \quad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0$$

$$\theta_S = \tan^{-1}(k_y / k_x)$$

olur.

LK Hamiltonianı için Eksen Yaklaşımı (Axial Approximation): Eğer R_k terimini

$$R_k = -\frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{2m_0} \left[\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} (k_x - ik_y)^2 + \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} (k_x + ik_y)^2 \right] \quad (5.21)$$

$$R_k \cong -\frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{2m_0} \bar{\gamma} (k_x - ik_y)^2 \quad (5.22)$$

şeklinde yazarsak (burada $\bar{\gamma} = \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}$ tür), o zaman alt bant enerji dağılım bağıntısının ϕ açısından bağımsız ($k_x - ik_y = k_t e^{i\phi}$) olduğu görülebilir ve Hamiltonian sadece $|\vec{k}_t|$ ye bağlı olur. Bu yaklaşıma “axial approximation” denir. Bu yaklaşımda, sadece R_k teriminde $\gamma_2 = \gamma_3$ ’e eşit olduğu farz edilir, diğer terimlerde γ_2 ve γ_3 hala farklı kullanılır.

2x2 Hamiltonianının Nümerik Çözümü:

$V_h(z)$ basamak türü potansiyel olduğunda kuyu ve potansiyel engeli arayüzeyleri arasında sınır koşulları dikkatli kullanılmalıdır. Temel düşünce zarf fonksiyonu ve akı yoğunluğunun olasılığının heteroyapıda arayüzeyden (kuyudan bariyere) geçerken sürekliliğinin korunmasıdır. Bu yüzden Hamiltonian’ın hermitienlik özelliğini sağlamak için tüm operatörleri aşağıdaki formda yazmalıyız.

$$A(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \frac{\partial}{\partial z} A(z) \frac{\partial}{\partial z} \quad (5.23)$$

$$B(z) \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \frac{1}{2} \left[B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} B(z) \right] \quad (5.24)$$

O zaman sınır şartlarımızı yukarıdaki 2x2 lik Hamiltonian için,

$$\begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} = \text{sürekli} \quad (5.25)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & \left(\frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \right) \sqrt{3} k_t \\ - \left(\frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \right) \sqrt{3} k_t & \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} = \text{sürekli} \quad (5.26)$$

Burada her

bölgenin γ_i ’si kullanılmalı.

Simetrik potansiyelde her alt bant için denklem (5.20)’deki üst blok Hamiltonian’ın $E_m^U(k_t)$, alt bloktaki Hamiltonianla $E_m^L(k_t)$ dejenere olduğu görülebilir.

“Axial” yaklaşım küçük k_i ’ler için çok iyi sonuçlar verir. Bu yaklaşım, baz fonksiyonlarında $k_x - k_y$ düzleminde ϕ bağımlılığını hesaba kattığından ve valans bandı enerjilerinin ϕ ’den bağımsız olmasından dolayı ilgi çekici bir yaklaşımdır. Bu dalga fonksiyonları kuantum kuyusu yapılarında kazanç ve soğurma çalışmalarında kullanılabilir.

5.2. Zorlanmanın Olduğu Durum

Bir zorlanma altındaki kuantum kuyusu için iletkenlik bant kenarı

$$E_c(k=0) = a_c \text{Tr}(\bar{\bar{\epsilon}}) = a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (5.27)$$

ile verilir. Burada $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{(a_0 - a)}{a}$ ve $\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx}$ tir. a_0 “substrate” nin örgü sabiti, a ise kuantum kuyusu materyalinin örgü sabitidir. Enerji, zorlama yok iken kuantum kuyusunun iletkenlik bant kenarından itibaren ölçülür. Bariyer malzemesinin, “substrate” nin kristal yapısına uyumlu olduğu kabul edilir, bu yüzden onların zorlaması sıfırdır.

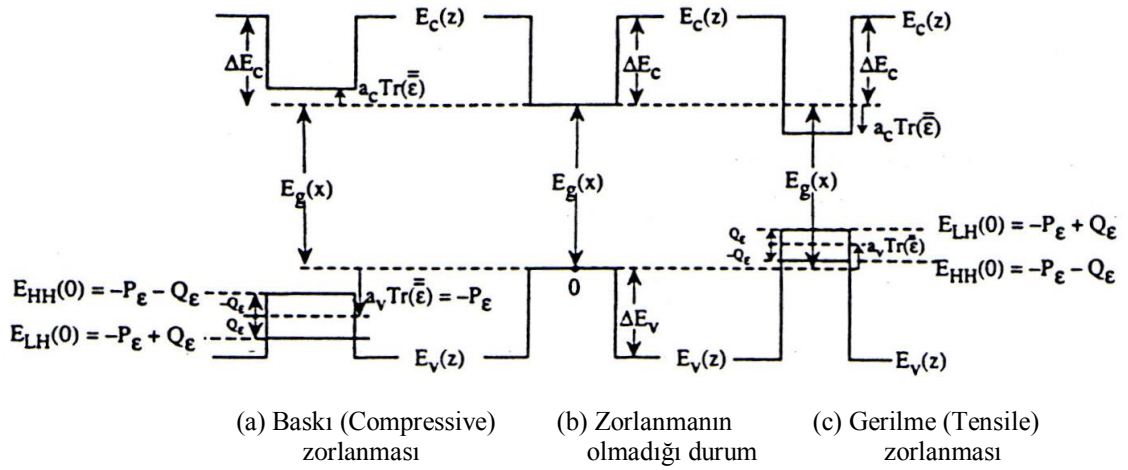
$$E_c(z, k=0) = \begin{cases} a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) & |z| \leq \frac{L_w}{2} \\ \underbrace{\Delta E_c} & |z| > \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (5.28)$$

Değişme yok, bariyerin

zorlama altında olmadığını kabul ettik.

Benzer olarak zorlama altında valans band kenarı enerjileri (spin yörünge bandı çiftlenimi ihmal edilmiş durumda)

$$E_{LH(HH)}(z) = \begin{cases} -P_\epsilon \pm Q_\epsilon & |z| \leq \frac{L_w}{2} \\ -\Delta E_v & |z| > \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (5.29)$$



Şekil 5.1. Kuantum kuyusunun bant kenarı profili [39] (a) baskı zorlaması durumu, (b) zorlanmanın olmadığı durum ve (c) gerilme zorlaması durumu.

Burada

$$P_\varepsilon = -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

dır. Zorlama terimlerini içeren H^{LK} Hamiltonianı kullanılarak kuyu için valans bandının enerji dağılımı bağıntısı ve öz fonksiyonları çözülebilir.

$$\left[\bar{H} \left(k_z = -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_h(z) \bar{I} \right] \begin{bmatrix} g_{3/2}(\vec{k}_t, z) \\ g_{1/2}(\vec{k}_t, z) \\ g_{-1/2}(\vec{k}_t, z) \\ g_{-3/2}(\vec{k}_t, z) \end{bmatrix} = E(\vec{k}_t) \begin{bmatrix} g_{3/2}(\vec{k}_t, z) \\ g_{1/2}(\vec{k}_t, z) \\ g_{-1/2}(\vec{k}_t, z) \\ g_{-3/2}(\vec{k}_t, z) \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

Burada $V_h(z)$ zorlama olmadan kuyunun potansiyelidir. Bant kenarı $-P_\varepsilon$ ve $\pm Q_\varepsilon$ nedeniyle kayar ve bu terimleri \bar{H} içermektedir. Kuantum kuyularının valans band yapısının belirlenebilmesi için (5.30)'da elde edilen çiftlenimli diferansiyel denklem takımları FEM (Finite Element Method) kullanılarak sayısal olarak çözülmelidir.

6. SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ (FINITE ELEMENT METHOD)

Sonlu Elemanlar Yöntemi (*Finite Element Method, FEM*) çok çeşitli fiziksel sistemlere ilişkin sayısal hesaplamalarda kullanılan bir yöntemdir [53]. Bir parçacıklı sistemin Hamiltonian'ı, $V(\vec{r})$ kuşatma potansiyeli olmak üzere,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (6.1)$$

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

$$H = -\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (6.2)$$

biçiminde elde edilebilir. Bu durumda boyutsuz Hamiltonian ile Schrödinger denklemi

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad (6.3)$$

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

$$\psi \rightarrow u(\vec{r}) \quad (\text{Elde edilecek dalga fonksiyonu})$$

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

$$Hu = \varepsilon u \quad (6.4)$$

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

$$u(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N u_n \Phi_n(\vec{r}) \quad (6.5)$$

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

$$\bar{\Phi}^T = \{\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \dots, \Phi_N\} \quad (6.6)$$

$$\bar{u}^T = \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_N\} \quad (6.7)$$

olmak üzere

$$u(\vec{r}) = \bar{\Phi}^T(\vec{r}) \cdot \bar{u} \quad (6.8)$$

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

$$G = \int_{\Omega} u^+ (H - \epsilon I) u \, d\tau \quad (6.9)$$

Burada I, $N \times N$ boyutlu birim matristir. Ayrıca $u(\vec{r})$, sisteme ilişkin tam çözüm ise $G = 0$, değil ise $G \neq 0$ olacaktır. G’yi minimum yapan $\{u, u^+\}$ ailesi enerjii de minimum kılacaktır. Aranan dalga fonksiyonu ve hermitik eşleniği yerine yazılırsa,

$$G = \bar{u}^+ \cdot \left[\int_{\Omega} \bar{\Phi}(\vec{r}) (H - \epsilon I) \bar{\Phi}^T(\vec{r}) \, d\tau \right] \cdot \bar{u} \quad (6.10)$$

ve sembolik değişim yazılırsa,

$$\frac{\partial G}{\partial u^+} = 0 \quad (6.11)$$

$$\left[\int_{\Omega} \bar{\Phi} (H - \epsilon I) \bar{\Phi}^T \, d\tau \right] \cdot \bar{u} = 0 \quad (6.12)$$

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

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

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

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

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

$$\bar{\Phi}_{\text{yüzey}} = 0 \quad (6.13)$$

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

$$\left[\int_{\Omega} d\tau \left[\bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T + \bar{\Phi} V(\bar{r}) \bar{\Phi}^T \right] \right] \cdot \bar{u} = \varepsilon \left[\int_{\Omega} d\tau \bar{\Phi} \bar{\Phi}^T \right] \cdot \bar{u} \quad (6.14)$$

Bu ifade yeni bir gösterimle

$$\bar{\bar{K}} \cdot \bar{u} = \varepsilon \bar{\bar{M}} \cdot \bar{u} \quad (6.15)$$

biçiminde yazılabilir. Literatürde,

$\bar{\bar{K}}$: Esneklik Matrisi (Stifness Matrix)

$\bar{\bar{M}}$: Kütle Matrisi (Mass Matrix)

olarak isimlendirilir ve

$$\bar{\bar{K}} = \int_{\Omega} d\tau \left[\bar{\nabla} \bar{\Phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\Phi}^T + \bar{\Phi} V(\bar{r}) \bar{\Phi}^T \right] \quad (6.16)$$

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

$$\int_{\Omega} d\tau = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} d\tau \quad (6.17)$$

O halde,

$$\bar{\bar{K}} = \sum_{e=1}^{N_e} \bar{\bar{k}}_e \quad \Leftarrow \quad \bar{\bar{k}}_e = \int_{\Omega_e} d\tau \left[\bar{\nabla} \bar{\phi} \cdot \bar{\nabla} \bar{\phi}^T + \bar{\phi} V \bar{\phi}^T \right] \quad (6.18)$$

$$\bar{\bar{M}} = \sum_{e=1}^{N_e} \bar{\bar{m}}_e \quad \Leftarrow \quad \bar{\bar{m}}_e = \int_{\Omega_e} d\tau \bar{\phi} \bar{\phi}^T \quad (6.19)$$

Burada,

$\bar{\phi}$: Global eleman baz fonksiyonu

$\bar{\Phi}$: Tüm uzayı geren baz fonksiyonu

dur. Uzay boyutuna göre, tüm uzay baz fonksiyonları global eleman baz fonksiyonları cinsinden yazılabilir.

6.1. Baz Fonksiyonları Seçimi

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

$$\{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_N\} \quad (6.20)$$

dir. Baz fonksiyonları ile uzayın herhangi bir fonksiyon üyesi, bazların lineer bileşimi olarak gösterilebilir. Örneğin z_N elemanlarına sahip kesikli uzayda aranan kesin çözüm $u(z)$ ’ye yaklaşık çözüm

$$U(z) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(z) \quad (6.21)$$

dir. Burada, c_j , skaler bir sabittir. Sıklıkla çözüm uzayını geren baz fonksiyonları, polinomların kolay tanımlanması ve iyi bilinen özelliklere sahip olması nedeniyle, sonlu boyuttaki polinom uzayı olarak seçilir. Bu durumda baz fonksiyonları polinomlardır ve n . derece bir polinom uzayı için baz fonksiyonu olarak seçilecek polinomun mertebesi $N = n + 1$ dir. Örnek olarak $\{1, z, z^2, \dots, z^N\}$ seçilebilir. Ancak herhangi bir lineer vektör uzayı için tek bir temel set olmadığından baz fonksiyonlarının seçimi esnekliklidir. Polinom uzayı baz fonksiyonları için de “*Lagrange Polinomları*” baz fonksiyonları olarak seçilebilir. Lagrange polinomları çazılma 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;

$$\phi_i(z_j) = \delta_{ij} \quad (6.22)$$

Bir boyutta 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 olur. Baz fonksiyonları z uzayında ve $\hat{\Omega} = [-1,1]$ aralığında aranır. Uzaydaki nod sayısı N_0 olsun ($N_0 \geq 2$).

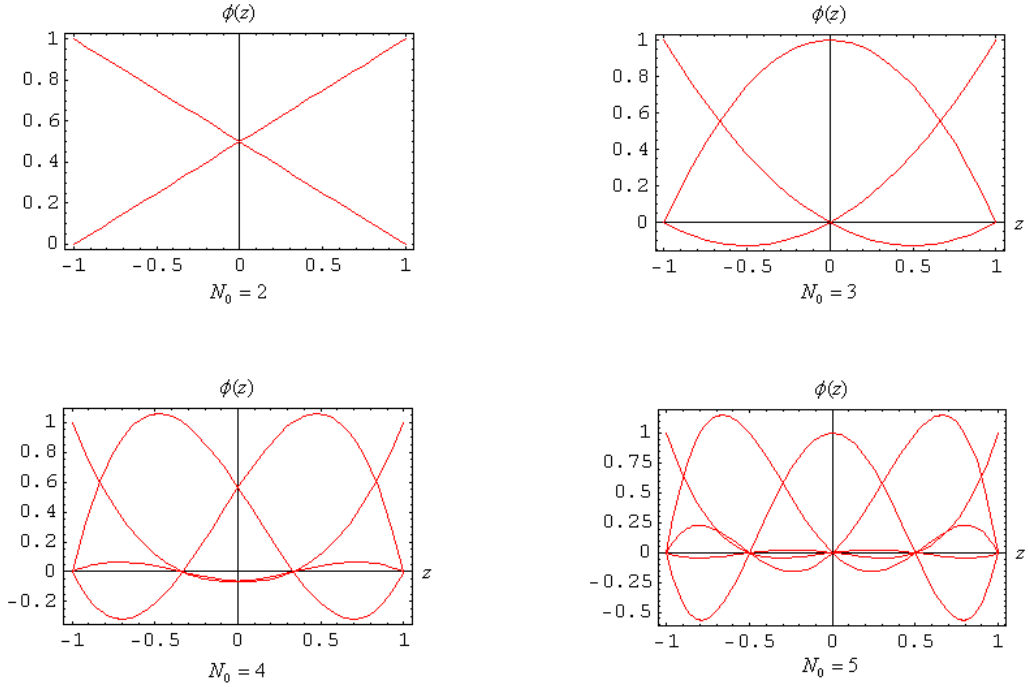
Burada oluşturulacak baz fonksiyonları N_0 tane olur ve z^{N_0-1} . dereceden polinomlardır.

$\phi_i(z_j) = \delta_{ij}$ koşulunu sağlayan polinomların seçimi şöyle olabilir;

$$\phi_i(z) = \Lambda_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z - z_j) \quad \phi_i(z_k) = \Lambda_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_k - z_j) \quad (6.23)$$

Burada Λ_i ler normalizasyon sabitidir.

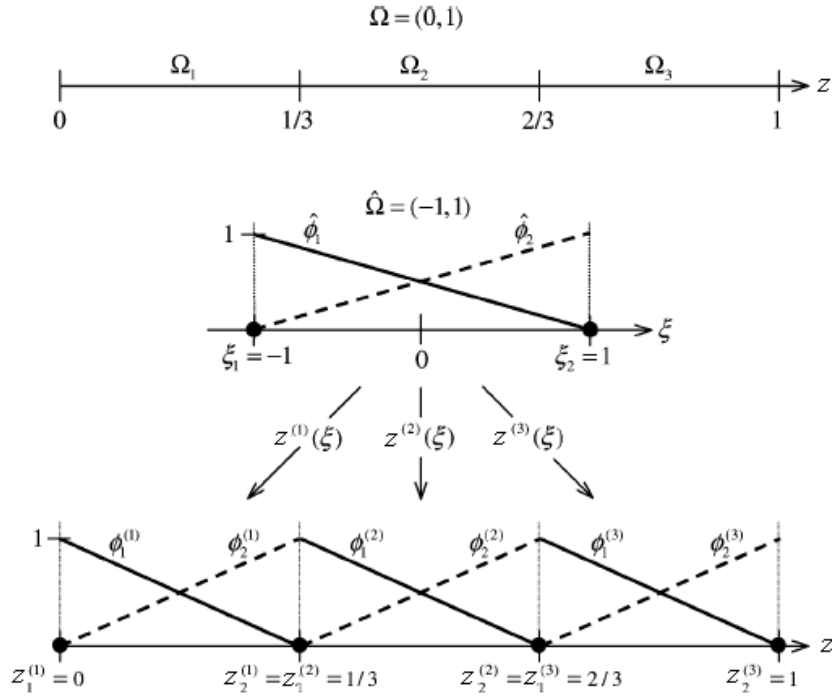
$$\Lambda_i = \frac{1}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_i - z_j)} \quad \phi_i(z_k) = \frac{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_k - z_j)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_0} (z_i - z_j)} \quad (6.24)$$



Şekil 6.1. z uzayında farklı düğüm noktası sayıları için baz fonksiyonları.

6.2. Bir Boyutta Parçalı Lineer Baz Fonksiyonları

Şekil 6.2.'deki gibi $\Omega = (0,1)$ çalışma uzayı için baz fonksiyonları arayalım. Çalışma uzayı 3 parçaya bölünebilir $(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$. Her bir elemanla birleştirilen yerel baz fonksiyonlarını oluşturmak için kullanılan ana baz (parent basis) $\{\hat{\phi}_i\}$, ana eleman (parent element) $\hat{\Omega} = (-1,1)$ üzerinde tanımlansın.



Şekil 6.2. Üç elemanlı çalışma uzayı, lineer baz fonksiyonları ve $[-1,1]$ aralığında elde edilen bazların çalışma uzayına yerleştirilmesi sonucu elde edilen global baz fonksiyonları

Böylelikle ana bazlar

$$\hat{\phi}_1(\xi) = \frac{\xi - \xi_2}{\xi_1 - \xi_2} = \frac{\xi - 1}{-1 - 1} = -\frac{1}{2}(\xi - 1) \quad \rightarrow \quad \hat{\phi}_1(\xi) = -\frac{1}{2}(\xi - 1) \quad (6.25)$$

$$\hat{\phi}_2(\xi) = \frac{\xi - \xi_1}{\xi_2 - \xi_1} = \frac{\xi - (-1)}{1 - (-1)} = \frac{1}{2}(\xi + 1) \quad \rightarrow \quad \hat{\phi}_2(\xi) = \frac{1}{2}(\xi + 1) \quad (6.26)$$

Herbir Ω_j elemanı ile ilişkili olan yerel baz fonksiyonları, ana eleman $\hat{\Omega}$ 'dan her bir Ω_j elemanına tanımlı $z^{(j)}(\xi)$ dönüşümü ile tanımlanır. Dönüşüm için z 'nin ξ ile ilişkisi elde edilmelidir.

$$z^{(j)}(\xi) = a^{(j)}\xi + b^{(j)} \quad (6.27)$$

$\xi = -1$ ve $\xi = 1$ için $z^{(j)}(\xi)$ değerleri nod indisleri cinsinden bilindiğinden,

$$z^{(j)}(\xi = -1) = -a^{(j)} + b^{(j)} = \frac{j-1}{N}, \quad z^{(j)}(\xi = 1) = a^{(j)} + b^{(j)} = \frac{j}{N} \quad (6.28)$$

bulunur. Dolayısıyla,

$$b^{(j)} = \frac{2j-1}{2N}, \quad a^{(j)} = \frac{1}{2N} \quad (6.29)$$

$$z^{(j)}(\xi) = \frac{1}{2N}\xi + \frac{2j-1}{2N} \quad (6.30)$$

ve ters dönüşüm ile

$$\xi^{(j)}(z) = 2Nz + (1-2j) \quad (6.31)$$

olur. O halde $N = 3$ ve $j = 1, 2, 3$ kullanılarak her bir eleman için

$$\begin{aligned} z^{(1)}(\xi) &= \frac{1}{6}\xi + \frac{1}{6} & \rightarrow & \xi^{(1)}(z) = 6z - 1 \\ z^{(2)}(\xi) &= \frac{1}{6}\xi + \frac{3}{6} & \rightarrow & \xi^{(2)}(z) = 6z - 3 \\ z^{(3)}(\xi) &= \frac{1}{6}\xi + \frac{5}{6} & \rightarrow & \xi^{(3)}(z) = 6z - 5 \end{aligned} \quad (6.32)$$

bulunur. Herbir elemana ait yerel baz fonksiyonları

$$\phi^{(j)}_i(z) \equiv \hat{\phi}_i[\xi^{(j)}(z)] \quad (6.33)$$

ifadesinden,

$$\begin{aligned} \phi^{(1)}_1(z) &= 1 - 3z, & \phi^{(1)}_2(z) &= 3z, & \phi^{(2)}_1(z) &= 2 - 3z \\ \phi^{(2)}_2(z) &= 3z - 1, & \phi^{(3)}_1(z) &= 3 - 3z, & \phi^{(3)}_2(z) &= 3z - 2 \end{aligned} \quad (6.34)$$

biçimindedir. Buradan hareketle z uzayında, çakışan nodlarda yerel baz fonksiyonları birleştirilerek parçalı global baz fonksiyonları elde edilir.

$$\phi_1(z) = \begin{cases} \phi^{(1)}_1(z), & z \in \Omega_1 \\ 0, & z \notin \Omega_1 \end{cases} \quad (6.35)$$

$$\phi_2(z) = \begin{cases} \phi^{(1)}_2(z), & z \in \Omega_1 \\ \phi^{(2)}_1(z), & z \in \Omega_2 \\ 0, & z \notin \Omega_1 \text{ ve } z \notin \Omega_2 \end{cases} \quad (6.36)$$

$$\phi_3(z) = \left\{ \begin{array}{ll} \phi^{(2)}_2(z), & z \in \Omega_2 \\ \phi^{(3)}_1(z), & z \in \Omega_3 \\ 0, & z \notin \Omega_2 \text{ ve } z \notin \Omega_3 \end{array} \right\} \quad (6.37)$$

$$\phi_4(z) = \left\{ \begin{array}{ll} \phi^{(3)}_2(z), & z \in \Omega_3 \\ 0, & z \notin \Omega_3 \end{array} \right\} \quad (6.38)$$

6.3. FEM (Finite Element Method)'in Çiftlenimsiz Bantlara Uygulanması

Basit olsun diye öncelikle çiftlenimsiz alt bantlarla işe başlanır. Örneğin, iletkenlik bantları için Hamiltonian

$$H^0 = \sum_{\alpha=x}^z \sum_{\beta=x}^z H_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta = \underbrace{(H_{xx}k_x^2 + H_{yy}k_y^2 + H_{xy}k_x k_y)}_{H_C(k_x, k_y)} + \underbrace{(H_{xz}k_x + H_{yz}k_y)}_{H_B(k_x, k_y)} k_z + \underbrace{H_{zz}k_z^2}_{H_A} \quad (6.39)$$

Kuantum kuyusunun

Matris değil,

Kuşatma potansiyelini içermiyor.

Çiftlenimsiz bantlar için skaler.

şeklinde yazılabilir.

z koordinatı için özel hareket, kuşatma doğrultusu bu doğrultu seçildiği için olur. Bu yüzden gerçekte H_A , H_B , H_C bariyer ve kuyu materyallerinin etkin kütesine (Luttinger parametrelerinin değişimine) bağlı olduğu kadar z'ye de bağlı olur. Böylece

$k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z}$ ve simetrik olarak

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} H_A(z) &\rightarrow \frac{\partial}{\partial z} H_A(z) \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial z} H_B(k_x, k_y, z) &\rightarrow \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} H_B(k_x, k_y, z) + H_B(k_x, k_y, z) \frac{\partial}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (6.40)$$

gibi yazılır. O zaman kuantum kuyusu (çiftlenimsiz) alt bantları için etkin kütle eşitliği

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} H_A \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(H_B \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} H_B \right) + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) = 0 \quad (6.41)$$

şeklinde verilir. Yukarıdaki denklemi soldan $g^\dagger(z)$ ile çarpıp $z \in [z_a, z_b]$ (çalışma uzayı) üzerinden integral alınırsa,

$$\int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[\underbrace{-\frac{\partial}{\partial z} H_A \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(H_B \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} H_B \right)}_{\text{Kısmi integrasyon uygulanırsa,}} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz = 0 \quad (6.42)$$

Kısmi integrasyon uygulanırsa,

$$\begin{aligned} & \int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial z} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz \\ & + \int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[-\frac{\partial}{\partial z} H_A \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial z} H_B \right] g(z) dz = 0 \\ & \underbrace{\hspace{10em}} \\ & u = g^\dagger(z) \quad \text{ve} \quad dv = \frac{\partial}{\partial z} \left[-H_A \frac{\partial g(z)}{\partial z} - \frac{i}{2} H_B g(z) \right] dz \end{aligned}$$

$$\text{olmak üzere} \quad \int_{z_a}^{z_b} u dv = uv \Big|_{z_a}^{z_b} - \int_{z_a}^{z_b} v du \quad \text{dir.}$$

$$\begin{aligned} & \int_{z_a}^{z_b} g^\dagger(z) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial z} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz + \\ & + \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} g^\dagger(z) \left[H_A \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} H_B \right] g(z) dz - \underbrace{g^\dagger(z) H_A \frac{\partial g(z)}{\partial z} - \frac{i}{2} g^*(z) H_B g(z)}_{\text{yüzey terimi}} \Big|_{z_a}^{z_b} = 0 \end{aligned} \quad (6.43)$$

Yüzey terimi önemlidir ve bu terimle ilgilenirken dikkatli olunmalıdır. Bununla birlikte bu terim sıfır alınabilir. Çünkü, çözülecek olan sistem uzayın belli bir bölgesine hapsolmuşsa sisteme ait dalga fonksiyonu uzayın hapsoldüğü kısmın sınırlarında sıfır olmalıdır. Bu koşul sistemin kesin çözümü olan ψ için geçerli olduğu gibi deneme fonksiyonu $g(z)$ için de geçerlidir.

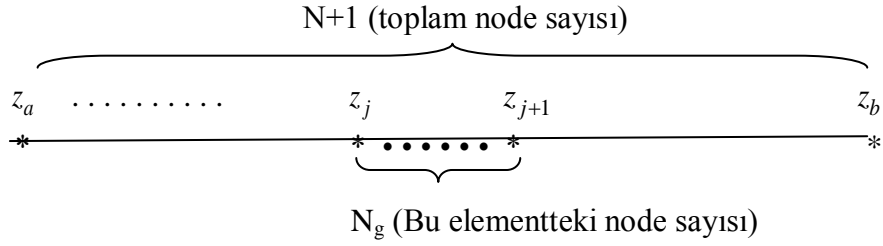
$$g(z_a) = g(z_b) = g^\dagger(z_a) = g^\dagger(z_b) = 0 \quad (6.43)$$

$[z_a, z_b]$ aralığı,

$$[z_a, z_b] \rightarrow [z_0, z_1] + [z_1, z_2] + \dots + [z_j, z_{j+1}] + \dots + [z_N, z_{N+1}] = \sum_{j=0}^N [z_j, z_{j+1}] \quad (6.44)$$

şeklinde N tane global elemente ayrılabilir. Dolayısıyla $\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} dz$ yazılabilir.

Burada, N+1 = Toplam node sayısını ifade eder, N = Global element sayısını ifade eder, N_g (veya n) = Global elementteki node sayısını ifade eder.



Bu bilgilerin ışığında üretici (generating) denklem

$$G = \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} g^\dagger(z) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial z} + H_C + (U_{QW}(z) - E) \right] g(z) dz + \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial}{\partial z} g^\dagger(z) \left[H_A \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} H_B \right] g(z) dz = 0 \quad (6.45)$$

şeklinde yazılabilir. Global element için aşağıdaki dönüşüm yapılırsa,

$$z_j \xrightarrow{*} z_{j+1} \quad \longrightarrow \quad \begin{array}{c} 0 \quad 1 \\ \longleftarrow s \end{array}$$

$$\begin{array}{l} s = az + b \quad \text{ise} \quad 1 = az_{j+1} + b \\ 0 = az_j + b \end{array} \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{l} a = \frac{1}{z_{j+1} - z_j} \\ b = -\frac{z_j}{z_{j+1} - z_j} \end{array}$$

elde edilir. Dolayısıyla,

$$s = \frac{z - z_j}{z_{j+1} - z_j} \quad L_j = z_{j+1} - z_j \quad \Rightarrow \quad ds = \frac{dz}{L_j} \quad (6.46)$$

şeklinde tanımlanan dönüşüm ile de,

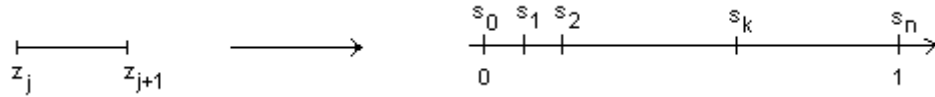
$$\int_{z_j}^{z_{j+1}} dz = L_j \int_0^1 ds \quad \text{ve} \quad \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \frac{\partial s}{\partial z} \frac{\partial}{\partial s} = \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} \quad (6.47)$$

$$g_j(z) \rightarrow g_j(s) \text{ (j.nci global element zarf fonksiyonu)} \quad (6.48)$$

olur. Dolayısıyla

$$\begin{aligned} G &= \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 g^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + H_C + (U_{QW}(s) - E) \right] g(s) ds \\ &+ \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \frac{1}{L_j} \frac{\partial (g^\dagger(z))}{\partial s} \left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right] g(s) ds = 0 \\ G &= \sum_{j=0}^N \int_0^1 g^\dagger(s) \left[-\frac{i}{2} H_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j (H_C + (U_{QW}(s) - E)) \right] g(s) ds \\ &+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial (g^\dagger(z))}{\partial s} \left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right] g(s) ds = 0 \end{aligned} \quad (6.49)$$

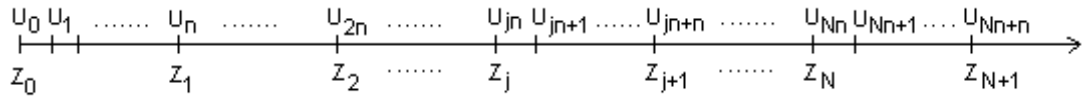
denklemleri elde edilir. Yukarıdaki s dönüşümüyle geçilen $[0,1]$ uzayında FEM bazları (ϕ 'lerin kümesi) oluşturulabilir. Bu uzayın (global elementin) n parçaya bölünmesiyle uzayda n . dereceden polinomla verilebilen $n+1$ tane baz fonksiyonu oluşturulabilir.



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

$$\phi_i(s) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{(s - s_k)}{(s_i - s_k)} \quad (6.50)$$

ile tanımlıdır. Şekilden de görülebilir ki, s uzayının n parçaya bölünmesi ile çözüm uzayının j .nci bölgesi de n parçaya bölünür. Dolayısıyla, çözüm uzayında ($[z_a, z_b]$) $n(N+1)+1$ nokta olduğudur. Enerji özdeğer denkleminin çözümü olan fonksiyonun bu noktalarındaki değerleri



Şekil 6.3. Çiftlenimsiz bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması

şeklinde olsun. Daha önce de belirtildiği gibi $U_0 = U_{Nn+n} = 0$ olmalıdır. $g_j(s)$ fonksiyonları oluşturulan baz fonksiyonlarının lineer bileşimi olarak yazılabilir.

$$g_j(s) = \sum_{k=1}^n U_{jn+k} \cdot \phi_k(s) \quad \Rightarrow \quad g_j^\dagger(s) = \sum_{k=1}^n U_{jn+k}^\dagger \cdot \phi_k(s) \quad (6.51)$$

Burada n global elementteki node sayısını (N_g), U_{jn+k} 'lar katsayıları, $\phi_k(s)$ 'ler de global element baz fonksiyonlarını temsil ediyor. Bu fonksiyonları matris formunda yazmak istersek;

$$g_j(s) = \bar{\phi}^T \bar{U}_{jn} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & \phi_2(s) & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{1 \times n} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (6.52)$$

$$g_j^\dagger(s) = \bar{U}_{jn}^\dagger \bar{\phi} = \begin{bmatrix} U_{jn+1}^* & U_{jn+2}^* & \dots & U_{jn+n}^* \end{bmatrix}_{1 \times n} \begin{bmatrix} \phi_1(s) \\ \phi_2(s) \\ \vdots \\ \phi_n(s) \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (6.53)$$

Not: $A^\dagger = (A^*)^T$ dir.

Bu matris gösterimi “generating” denkleminde kullanılırsa,

$$G = \sum_{j=0}^N \int_0^1 \begin{bmatrix} U_{jn+1}^* & U_{jn+2}^* & \dots & U_{jn+n}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1(s) \\ \phi_2(s) \\ \vdots \\ \phi_n(s) \end{bmatrix} \underbrace{\left[-\frac{iH_B}{2} \frac{\partial}{\partial s} + L_j (H_C + (U_{QW}(s) - E)) \right]}_{AA} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & \phi_2(s) & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} ds + \quad (6.54)$$

$$+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \begin{bmatrix} U_{jn+1}^* & U_{jn+2}^* & \dots & U_{jn+n}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1(s) \\ \phi_2(s) \\ \vdots \\ \phi_n(s) \end{bmatrix} \underbrace{\left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right]}_{BB} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & \phi_2(s) & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} ds = 0$$

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \left[U_{jm+1}^* \quad U_{jm+2}^* \quad \dots \quad U_{jm+n}^* \right] & \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi_1(s) AA \phi_1(s) ds & \int_0^1 \phi_1(s) AA \phi_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \phi_1(s) AA \phi_n(s) ds \\ \int_0^1 \phi_2(s) AA \phi_1(s) ds & \int_0^1 \phi_2(s) AA \phi_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \phi_2(s) AA \phi_n(s) ds \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \int_0^1 \phi_n(s) AA \phi_1(s) ds & \dots & \dots & \int_0^1 \phi_n(s) AA \phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\overline{AA}} \begin{bmatrix} U_{jm+1} \\ U_{jm+2} \\ \vdots \\ U_{jm+n} \end{bmatrix} + \\
+ \sum_{j=0}^N \left[U_{jm+1}^* \quad U_{jm+2}^* \quad \dots \quad U_{jm+n}^* \right] & \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} AA \phi_1(s) ds & \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} AA \phi_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} AA \phi_n(s) ds \\ \int_0^1 \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} AA \phi_1(s) ds & \int_0^1 \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} AA \phi_2(s) ds & \dots & \int_0^1 \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} AA \phi_n(s) ds \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \int_0^1 \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} AA \phi_1(s) ds & \dots & \dots & \int_0^1 \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} AA \phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\overline{BB}} \begin{bmatrix} U_{jm+1} \\ U_{jm+2} \\ \vdots \\ U_{jm+n} \end{bmatrix} = 0 \tag{6.55}
\end{aligned}$$

$$G = \sum_{j=0}^N \left[U_{jm+1}^* \quad U_{jm+2}^* \quad \dots \quad U_{jm+n}^* \right] \left[\overline{AA} + \overline{BB} \right] \begin{bmatrix} U_{jm+1} \\ U_{jm+2} \\ \vdots \\ U_{jm+n} \end{bmatrix} = 0 \tag{6.56}$$

elde edilir. Burada \overline{AA} ve \overline{BB} matrisinin elemanları aşağıdaki biçimde yazılabilir.

$$AA_{11} = \int_0^1 \phi_1(s) \left[-\frac{iH_B}{2} \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(H_C + (U_{QW}(s) - E) \right) \right] \phi_1(s) ds$$

$$AA_{11} = \int_0^1 \phi_1(s) \left(-\frac{iH_B}{2} \right) \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \phi_1(s) L_j \left(H_C + (U_{QW}(s) - E) \right) \phi_1(s) ds$$

dir. Dolayısıyla

$$AA_{kk} = \int_0^1 \phi_k(s) \left(-\frac{iH_B}{2} \right) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \phi_k(s) L_j \left(H_C + (U_{QW}(s) - E) \right) \phi_k(s) ds$$

yazılabilir. Aynı şekilde

$$BB_{11} = \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \left[H_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} H_B \right] \phi_1(s) ds$$

$$BB_{11} = \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \frac{H_A}{L_j} \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \frac{iH_B}{2} \phi_1(s) ds$$

$$BB_{kk} = \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{H_A}{L_j} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{iH_B}{2} \phi_k(s) ds$$

yazılabilir. Buradan $\overline{\overline{AA+BB}}$ matrisinin elemanları için ($k=1,2,\dots,n$ (global elementteki node sayısı) olmak üzere)

$$\begin{aligned} \left(\overline{\overline{AA+BB}}\right)_{kk} &= \frac{H_A^j}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{iH_B^j}{2} \left[\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \right] + \\ &+ L_j \left(H_C^j + \left(U_{QW}^j(s) - E \right) \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (6.57)$$

yazılabilir. H_A^j , H_B^j , H_C^j ve $U_{QW}^j(s)$ terimlerindeki j indisleri bu terimlerin z bağımlılıklarını ifade eder. Nodları, j .nci materyaldeki özelliklerin (yarıiletkenin özellikleri) ve kuşatma potansiyelinin sabit olduğunu kabul ettiğimizi düşündük.

$\overline{\overline{AA+BB}}$ matrisi,

$$\begin{aligned} \left(\overline{\overline{AA+BB}}\right)_{kk} &= \frac{H_A^j}{L_j} \underbrace{\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds}_{\left(\overline{\overline{K_1}}\right)_{kk}} + \frac{iH_B^j}{2} \underbrace{\left[\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \right]}_{\left(\overline{\overline{K_2}}\right)_{kk}} + \\ &+ L_j \left(H_C^j + U_{QW}^j(s) \right) \underbrace{\int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds}_{\left(\overline{\overline{M_1}}\right)_{kk}} - L_j E \underbrace{\int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds}_{\left(\overline{\overline{M_1}}\right)_{kk}} \\ \overline{\overline{AA+BB}} &= \underbrace{\frac{H_A^j}{L_j} \overline{\overline{K_1}} + \frac{iH_B^j}{2} \overline{\overline{K_2}}}_{\overline{\overline{K}}} + L_j \left(H_C^j + U_{QW}^j(s) \right) \overline{\overline{M_1}} - \underbrace{E L_j \overline{\overline{M_1}}}_{\overline{\overline{M}}} \end{aligned} \quad (6.58)$$

$$\overline{\overline{AA+BB}} = \overline{\overline{K}} - E \overline{\overline{M}} \quad (6.59)$$

$$G = \sum_{j=0}^N \begin{bmatrix} U_{jn+1}^* & U_{jn+2}^* & \dots & U_{jn+n}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\overline{K}} - E \overline{\overline{M}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{jn+1} \\ U_{jn+2} \\ \vdots \\ U_{jn+n} \end{bmatrix} = 0 \quad (6.60)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda elde edilen son eşitlikten ve

$$\boxed{\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k}^*} = 0} \quad , \quad jn+k = 1, 2, \dots, Nn+n-1 \quad (6.61)$$

denkleminde yararlanarak $Nn+n-1$ tane FEM eşitliği bulunur.

şeklinde yazılır. Burada

$$\bar{g}(z, \bar{k}_t) = \left[\begin{array}{c} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_C}(z) \end{array} \right] \left. \vphantom{\begin{array}{c} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_C}(z) \end{array}} \right\} N_C \text{ tane çiftlenimli bantların zarf fonksiyonu} \quad (6.66)$$

Kuantum kuyusunun z doğrultusu boyunca oluşturulduğu kabul edilir [Bizim hesaplamalarımızda $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ Zinc Blende yapısında olduğundan $N_C = 6$ olur yani, çiftlenimin lh , hh ve so bantlarında olduğu varsayılır.] ve $\bar{H}(\bar{k}_t, k_z = -i \frac{\partial}{\partial z})$

çiftlenimsiz band durumundaki gibi

$$\bar{H}(\bar{k}_t, k_z) = \bar{H}_A k_z^2 + \bar{H}_B k_z + \bar{H}_C \quad (6.67)$$

şeklinde yazılabilir (operatör k_z içinde gizlidir). Burada,

$$\bar{H} = - \left[\begin{array}{cccccc} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^+ & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle (HH \uparrow \text{bandı}) \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle (LH \uparrow \text{bandı}) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle (LH \downarrow \text{bandı}) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle (HH \downarrow \text{bandı}) \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle (SO \uparrow \text{bandı}) \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle (SO \downarrow \text{bandı}) \end{array} \right] \quad (6.68)$$

$$P = P_k + P_\varepsilon \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon$$

$$R = R_k + R_\varepsilon \quad S = S_k + S_\varepsilon$$

$$P_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$Q_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$R_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} (-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y)$$

$$S_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y) k_z$$

$$P_\varepsilon = -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$R_\varepsilon = \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} \quad S_\varepsilon = -d (\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz})$$

şeklinde verilir. \overline{H}_A , \overline{H}_B ve \overline{H}_C 'nin açık biçimleri **EK-3**'te verilmiştir. Burada a_v , b , d "Pikus-Bir" deformasyon potansiyelleridir; ε_{ij} simetrik zorlanma tensörü (strain tensor); γ_1, γ_2 ve γ_3 Luttinger ters kütle parametreleri; Δ ise spin yörünge etkileşme enerjisidir (split-off energy). $|j, m\rangle$ baz fonksiyonları bölge merkezindeki Bloch fonksiyonlarını temsil ederler ve

$$|1\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(x+iy) \uparrow\rangle \quad (HH \uparrow \text{ bandı})$$

$$|2\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |-(x+iy) \downarrow + 2z \uparrow\rangle \quad (LH \uparrow \text{ bandı})$$

$$|3\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(x-iy) \uparrow + 2z \downarrow\rangle \quad (LH \downarrow \text{ bandı})$$

$$|4\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(x-iy) \downarrow\rangle \quad (HH \downarrow \text{ bandı})$$

$$|5\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(x+iy) \downarrow + z \uparrow\rangle \quad (SO \uparrow \text{ bandı})$$

$$|6\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(x-iy) \uparrow - z \downarrow\rangle \quad (SO \downarrow \text{ bandı})$$

şeklinde daha önce tanımlanmışlardı. Ayrıca burada zorlama yok iken valans bandının tepesi sıfır enerjili nokta olarak alınmıştır. Yukarıdaki Hamiltonian, zorlamanın yarıiletkenlerin bant yapısına etkisini konu alan çalışmalarda çoğunlukla kullanılır.

Kuşatma doğrultusu z doğrultusu olduğundan $k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z}$ operatör formu etkin

kütle denkleminde yazılırsa,

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \overline{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\overline{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{H}_B(z) \right) + \overline{H}_C(z) + U_{QW}(z) \overline{I} \right] \overline{g}(z, \vec{k}_t) = E(k_t) \overline{g}(z, \vec{k}_t) \quad (6.69)$$

elde edilir. Yukarıdaki denklemi \bar{g}^\dagger ile soldan çarpıp $[z_a, z_b]$ üzerinden integral alınırsa (Genellikle $[z_a, z_b]$ aralığı bütün çalışma uzayını kapsar.)

Bu terimlerin integrali alınırsa.

$$\int_{z_a}^{z_b} \bar{g}^\dagger(z, \bar{k}_t) \left[-\frac{\partial}{\partial z} \overline{H_A}(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\overline{H_B}(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{H_B}(z) \right) + \overline{H_C}(z) + (U_{QW} - E) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \bar{k}_t) dz = 0 \quad (6.70)$$

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

$$-\bar{g}^\dagger(z, \bar{k}_t) \left[\overline{H_A}(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \overline{H_B}(z) \right] \bar{g}(z, \bar{k}_t) \Big|_{z_a}^{z_b} = 0 \quad (6.71)$$

\swarrow \downarrow \searrow \swarrow
 $\left[g_1^* \quad g_2^* \quad \dots \quad g_{N_C}^* \right]$ $N_C \times N_C$ matris $N_C \times 1$ matris arayüzey terimi

Not: Bizim hesaplamalarımızda $N_C = 6$ olarak alındı. Yani, iki defa yozlaşmış HH bandı, iki defa yozlaşmış LH ve iki defa yozlaşmış SO bandı.

Başlangıçta arayüzey teriminin sifıra eşit olduğu kabul edilir. Dolayısıyla,

$$\int_{z_a}^{z_b} \bar{g}^\dagger(z, \bar{k}_t) \left[-\frac{i}{2} \overline{H_B}(z) \frac{\partial}{\partial z} + \overline{H_C}(z) + (U_{QW} - E) \bar{I} \right] \bar{g}(z, \bar{k}_t) dz + \int_{z_a}^{z_b} \frac{\partial}{\partial z} \bar{g}^\dagger(z, \bar{k}_t) \left[\overline{H_A}(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \overline{H_B}(z) \right] \bar{g}(z, \bar{k}_t) dz = 0 \quad (6.72)$$

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

$$\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} dz \quad (6.73)$$

olur. Bu bilgilerin ışığında,

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \overline{g}^{\dagger}(z, \overline{k}_t) \left[-\frac{i}{2} \overline{H}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \overline{H}_C(z) + (U_{QW} - E) \overline{I} \right] \overline{g}(z, \overline{k}_t) dz \\
&+ \sum_{j=0}^N \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial}{\partial z} \overline{g}^{\dagger}(z, \overline{k}_t) \left[\overline{H}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2} \overline{H}_B(z) \right] \overline{g}(z, \overline{k}_t) dz = 0
\end{aligned} \tag{6.74}$$

yazılabilir. Global element için aşağıdaki dönüşüm yapılırsa,

$$\begin{array}{ccc}
z_j * \text{-----} * z_{j+1} & \longrightarrow & \begin{array}{c} \text{-----} \\ 0 \quad 1 \end{array} s
\end{array}$$

$$\begin{array}{ccc}
s = az + b \quad \text{ise} & \begin{array}{l} 1 = az_{j+1} + b \\ 0 = az_j + b \end{array} & \begin{array}{l} a = \frac{1}{z_{j+1} - z_j} \\ b = -\frac{z_j}{z_{j+1} - z_j} \end{array}
\end{array}$$

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,

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

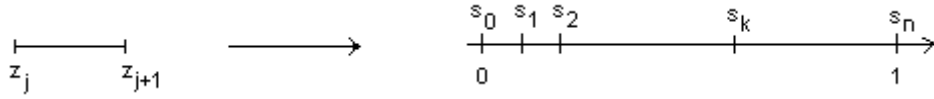
$$\overline{g}_j(z)_{N \times 1} \rightarrow \overline{g}_j(s)_{N \times 1} \quad (\text{j.nci global element zarf fonksiyonu})$$

olur. Buradan

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{j=0}^N L_j \int_0^1 \overline{g}^{\dagger}(s) \left[-\frac{i}{2} \overline{H}_B \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \overline{H}_C + (U_{QW} - E) \overline{I} \right] \overline{g}(s) ds \\
&+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} \overline{g}^{\dagger}(s) \left[\overline{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \overline{H}_B \right] \overline{g}(s) ds = 0
\end{aligned} \tag{6.75}$$

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{j=0}^N \int_0^1 \overline{g}^{\dagger}(s) \left[-\frac{i}{2} \overline{H}_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(\overline{H}_C + (U_{QW} - E) \overline{I} \right) \right] \overline{g}(s) ds \\
&+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \overline{g}^{\dagger}(s) \left[\overline{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \overline{H}_B \right] \overline{g}(s) ds = 0
\end{aligned} \tag{6.76}$$

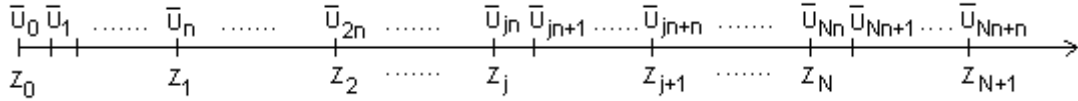
denklemleri elde edilir. Yukarıdaki s dönüşümüyle geçilen [0,1] uzayında FEM bazları (ϕ 'lerin kümesi) oluşturulabilir. Bu uzayın (global elementin) n parçaya bölünmesiyle uzayda n. dereceden polinomla verilebilen (n + 1) tane baz fonksiyonu oluşturulabilir.



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

$$\phi_i(s) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{(s - s_k)}{(s_i - s_k)} \quad (6.77)$$

ile tanımlıdır. Şekil 6.4.'ten de görülebilir ki, s uzayının n parçaya bölünmesi ile çözüm uzayının j .nci bölgesi de n parçaya bölünmüştür. Dolayısıyla, çözüm uzayında $([z_a, z_b])$ $n \cdot (N+1) + 1$ nokta olduğudur. Enerji özdeğer denkleminin çözümü olan fonksiyonun bu noktalarındaki değerleri \bar{U}_{jn+k} ile verilir.



Şekil 6.4. Çiftlenimli bantlar durumu için çalışma uzayının bölmelere ayrılması

Burada \bar{U}_{jn+k} , $N_c \times 1$ lik bir matristir (Bizim hesaplamalarımızda \bar{U} 6×1 'lik bir matristir).

$$\bar{U}_{jn+k} = \begin{bmatrix} U_{jn+k,1} \\ U_{jn+k,2} \\ \vdots \\ U_{jn+k,\ell} \\ \vdots \\ U_{jn+k,N_c} \end{bmatrix} \quad (6.78)$$

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

$$\bar{g}_j(s) = \overline{\phi(s)}^T \bar{U}_{jn+k} \quad (6.79)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}(s) \\ g_{j,2}(s) \\ \vdots \\ g_{j,\ell}(s) \\ \vdots \\ g_{j,N_c}(s) \end{bmatrix}_{N_c \times 1} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_c \times N_c \cdot n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix}_{N_c \cdot n \times 1} \quad (6.80)$$

N_C tane sütün

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}(s) \\ g_{j,2}(s) \\ \vdots \\ g_{j,\ell}(s) \\ \vdots \\ g_{j,N_C}(s) \end{bmatrix}_{N_C \times 1} = \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & \dots & \phi_n(s) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & \phi_n(s) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & \phi_2(s) & \dots & 0 & 0 & \dots & \phi_n(s) \end{bmatrix}_{N_C \times N_C \cdot n} \begin{bmatrix} U_{jn+1,1} \\ U_{jn+1,2} \\ \vdots \\ U_{jn+1,N_C} \\ U_{jn+2,1} \\ U_{jn+2,2} \\ \vdots \\ U_{jn+2,N_C} \\ \vdots \\ U_{jn+n,1} \\ U_{jn+n,2} \\ \vdots \\ U_{jn+n,N_C} \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times 1} \quad (6.81)$$

N_C 'ye N_C 'nci eleman

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

$$\overline{g_j^\dagger}(s) = \overline{U_{jn+k}^\dagger} \overline{\phi(s)} \quad (6.82)$$

$$\begin{bmatrix} g_{j,1}^*(s) & g_{j,2}^*(s) & \dots & g_{j,\ell}^*(s) & \dots & g_{j,N_C}^*(s) \end{bmatrix}_{1 \times N_C} = \begin{bmatrix} \overline{U_{jn+1}^\dagger} & \overline{U_{jn+2}^\dagger} & \dots & \overline{U_{jn+n}^\dagger} \end{bmatrix}_{1 \times N_C \cdot n} \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \phi_2(s) & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \phi_n(s) & 0 \end{bmatrix}_{N_C \cdot n \times N_C} \quad (6.83)$$

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

şeklinde yazılabilir. Bu bilgiler kullanılarak üretici denklem

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \int_0^1 \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \bar{U}_{jn+2}^\dagger \cdots \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] & \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_2(s) & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_n(s) & \vdots \end{bmatrix} \cdot \overline{AA} \cdot \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 & 0 & \phi_n(s) & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \cdots & 0 & 0 & \vdots & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & \phi_2(s) & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \phi_n(s) & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds + \\
+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \bar{U}_{jn+2}^\dagger \cdots \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] & \begin{bmatrix} \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_1(s) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \phi_1(s) \\ \phi_2(s) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_2(s) & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_2(s) & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_n(s) & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \phi_n(s) & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_n(s) & \vdots \end{bmatrix} \cdot \overline{BB} \cdot \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 & 0 & \phi_n(s) & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \cdots & 0 & 0 & \vdots & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \phi_1(s) & 0 & 0 & \cdots & \phi_2(s) & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \phi_n(s) & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds = 0
\end{aligned} \tag{6.84}$$

olur. Burada

$$\overline{AA} = \left[-\frac{i}{2} \overline{H_B} \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(\overline{H_C} + (U_{QW} - E) \overline{I} \right) \right] \rightarrow \text{Nc x Nc 'lik bir matris}$$

$$\overline{BB} = \left[\overline{H_A} \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \overline{H_B} \right] \rightarrow \text{Nc x Nc 'lik bir matris}$$

dir. Dolayısıyla,

$$\begin{aligned}
G = \sum_{j=0}^N \int_0^1 \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \bar{U}_{jn+2}^\dagger \cdots \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] & \begin{bmatrix} \phi_1(s) \overline{AA} \phi_1(s) & \phi_1(s) \overline{AA} \phi_2(s) & \cdots & \phi_1(s) \overline{AA} \phi_n(s) \\ \phi_2(s) \overline{AA} \phi_1(s) & \phi_2(s) \overline{AA} \phi_2(s) & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \phi_n(s) \overline{AA} \phi_1(s) & \cdots & \cdots & \phi_n(s) \overline{AA} \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds + \\
+ \sum_{j=0}^N \int_0^1 \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \bar{U}_{jn+2}^\dagger \cdots \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right] & \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) & \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_2(s) & \cdots & \frac{\partial \phi_1(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_n(s) \\ \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) & \frac{\partial \phi_2(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_2(s) & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_1(s) & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_n(s)}{\partial s} \overline{BB} \phi_n(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix} ds = 0
\end{aligned} \tag{6.85}$$

$$G = \sum_{j=0}^N \left[\overline{U}_{jn+1}^\dagger \overline{U}_{jn+2}^\dagger \cdots \overline{U}_{jn+n}^\dagger \right] \underbrace{\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi_1(s) \overline{AA}\phi_1(s) ds & \int_0^1 \phi_1(s) \overline{AA}\phi_2(s) ds & \cdots & \int_0^1 \phi_1(s) \overline{AA}\phi_n(s) ds \\ \int_0^1 \phi_2(s) \overline{AA}\phi_1(s) ds & \int_0^1 \phi_2(s) \overline{AA}\phi_2(s) ds & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \int_0^1 \phi_n(s) \overline{AA}\phi_1(s) ds & \cdots & \cdots & \int_0^1 \phi_n(s) \overline{AA}\phi_n(s) ds \end{bmatrix}}_{\overline{O} \text{ dersek}} \begin{bmatrix} \overline{U}_{jn+1} \\ \overline{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \overline{U}_{jn+n} \end{bmatrix} + \quad (6.86)$$

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

\overline{O} matrisinin kk 'ncı elemanı

$$\begin{aligned} \left(\overline{O} \right)_{kk} &= \int_0^1 \phi_k(s) \left[-\frac{i}{2} \overline{H}_B \frac{\partial}{\partial s} + L_j \left(\overline{H}_C + (U_{QW} - E) \overline{I} \right) \right] \phi_k(s) ds \\ &= -\frac{i}{2} \overline{H}_B \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + L_j \left(\overline{H}_C + U_{QW} \overline{I} \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds - L_j E \overline{I} \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (6.87)$$

şeklinde yazılabilir. Aynı şekilde \overline{P} matrisi için de

$$\begin{aligned} \left(\overline{P} \right)_{kk} &= \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \left[\overline{H}_A \frac{1}{L_j} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{i}{2} \overline{H}_B \right] \phi_k(s) ds \\ &= \frac{\overline{H}_A}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{i}{2} \overline{H}_B \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (6.88)$$

yazılabilir. Dolayısıyla,

$$\begin{aligned} \left(\overline{O} + \overline{P} \right)_{kk} &= \frac{\overline{H}_A^j}{L_j} \int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds + \frac{i}{2} \overline{H}_B^j \left(\int_0^1 \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} \phi_k(s) ds - \int_0^1 \phi_k(s) \frac{\partial \phi_k(s)}{\partial s} ds \right) \\ &\quad + L_j \left(\overline{H}_C^j + U_{QW}^j \overline{I} \right) \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds - L_j E \overline{I} \int_0^1 \phi_k(s) \phi_k(s) ds \end{aligned} \quad (6.89)$$

yazılabilir. Bu son eşitlik kullanılırsa,

$$G = \sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \cdots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right]_{1 \times Nc.n} \left(\bar{O} + \bar{P} \right)_{Nc.n \times Nc.n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix}_{Nc.n \times 1} = 0 \quad (6.90)$$

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

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

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

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

$$\bar{O} + \bar{P} = \bar{K} - E \bar{M} \quad (6.91)$$

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

$$\frac{\partial G}{\partial U_{jn+k,\ell}^*} = 0 \quad \left(\begin{array}{l} jn+k = 1, 2, \dots, n, n+1, n+2, \dots, 2n, 2n+1, \dots, jn, jn+1, \dots, jn+k, \dots, Nn+n-1 \\ \ell = 1, 2, \dots, Nc \quad ; \quad k = 1, 2, \dots, n \end{array} \right) \quad (6.92)$$

denklemini kullanılır. Dolayısıyla,

$$G = \sum_{j=0}^N \left[\bar{U}_{jn+1}^\dagger \quad \bar{U}_{jn+2}^\dagger \quad \cdots \quad \bar{U}_{jn+n}^\dagger \right]_{1 \times Nc.n} \left(\bar{K} - E \bar{M} \right)_{Nc.n \times Nc.n} \begin{bmatrix} \bar{U}_{jn+1} \\ \bar{U}_{jn+2} \\ \vdots \\ \bar{U}_{jn+n} \end{bmatrix}_{Nc.n \times 1} = 0 \quad (6.93)$$

ve

7. ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN İLETKENLİK BANDI YAPISI VE BANT İÇİ SOĞURMA

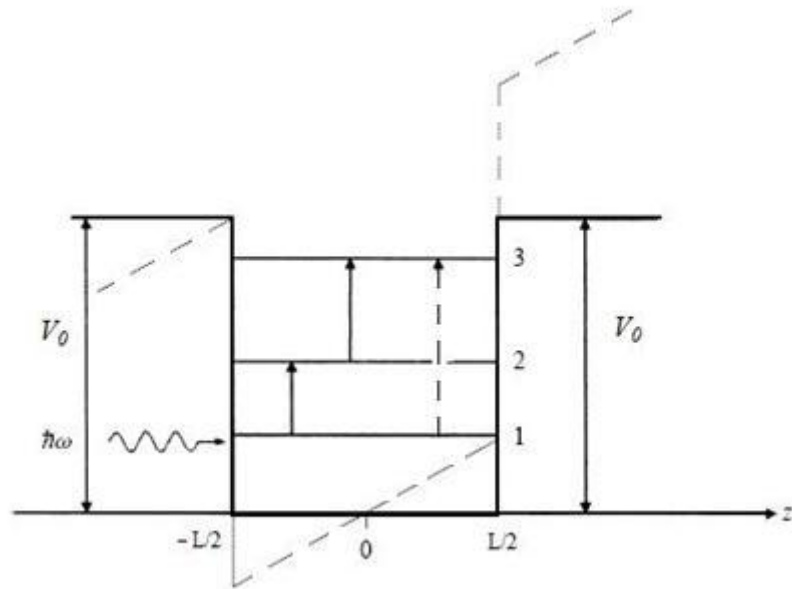
$+z_e$ doğrultusunda uygulanan elektrik alan ve baskı altındaki bir yarıiletken kuantum kuyusunun iletkenlik bandı için Hamiltonian

$$H = \frac{\hbar^2 k_{z_e}^2}{2m_e(z_e)} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_e(z_e)} + eFz_e + V_C(z_e) + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (7.1)$$

şeklinde yazılır. Burada, $V_C(z_e)$

$$V_C(z_e) = \begin{cases} Q_C \Delta E_g, & z_e < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} \leq z_e \leq \frac{L}{2} \\ Q_C \Delta E_g, & z_e > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (7.2)$$

ile verilir. Burada $Q_C = 0.60$ olarak alınmıştır. Yukarıdaki Hamiltonian kullanılarak özdeğer denkleminin çözümü, Bölüm 6.3.'te anlatılan çiftlenimsiz bantlar için sonlu elemanlar yöntemi ile yapıldı. İletkenlik bandındaki bir elektron için dalga fonksiyonları ile alt bant enerji değerlerinin elektrik alan ve baskı altındaki değişimi elde edildi. Hesaplamalarda kullanılan fiziksel parametreler Ref. 39 ve Ref.40'tan alındı.



Şekil 7.1. Sonlu kuantum kuyusunun $F = 0$ (sürekli çizgi) ve $F \neq 0$ (kesikli çizgi) için izinli olası geçişlerin şematik gösterimi

Optik radyasyon altında bir kristaldeki elektronla radyasyon arasındaki etkileşim Hamiltonianı

$$H' = -\frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \vec{p} = -\frac{e}{2m_0} A_0 [e^{-i\vec{q}\vec{r}-i\omega t} + cc] \hat{\epsilon} \vec{p} \quad (7.3)$$

şeklinde verilir. Burada, \vec{A} vektör potansiyeli, $\hat{\epsilon}$ polarizasyon vektörü, \vec{q} gelen optik radyasyon için dalga vektörü, e elektronun yükü, m_0 serbest elektron kütlesi ve \vec{p} kristaldeki elektronun momentum vektörüdür. H' etkileşim potansiyeli için geçiş oranı

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (7.4)$$

şeklinde verilir[54]. Burada E_i ve E_f sırasıyla başlangıç ve son durumdaki elektronun enerjileri, ω gelen fotonun açısal frekansıdır. Başlangıç durumu dalga fonksiyonu ve soğurma sonucu son durum dalga fonksiyonu sırasıyla

$$\psi_i(\vec{r}) = u_c(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}}}{\sqrt{A}} g_i(z) \quad (7.5)$$

$$\psi_f(\vec{r}) = u_{c'}(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}'_i \cdot \vec{\rho}}}{\sqrt{A}} g_f(z) \quad (7.6)$$

ile verilir. Burada, A kuantum kuyusunun alanı, \vec{k}_i ve \vec{k}'_i sırasıyla elektronun başlangıç ve son durumunda (x - y) düzlemindeki dalga vektörleri, $\vec{\rho}$ (x - y) düzlemindeki konum vektörü, $u_c(\vec{r})$ ve $u_{c'}(\vec{r})$ iletkenlik bandı minimumu civarındaki periyodik baz fonksiyonlarıdır. $g_i(z)$ ve $g_f(z)$ zarf fonksiyonları aşağıdaki Schrödinger eşitliğine uyarlar.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_e} \frac{1}{m_e(z_e)} \frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_e(z_e)} + eFz_e + V_c(z_e) + a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \right) g(z_e) = E g(z_e) \quad (7.7)$$

Genel olarak, foton soğurmanın matris elemanı yaklaşık olarak

$$\langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle \cong \int_{\Omega} u_{c'}^* H' u_c d\tau \int_V g_f^* g_i d\tau + \int_{\Omega} u_{c'}^* u_c d\tau \int_V g_f^* H' g_i d\tau \quad (7.8)$$

şeklinde yazılır [55]. Yukarıdaki denklemin birinci terimindeki ikinci integral doğrudan bant içi geçiş durumu için sıfırı verir. Bunun için bant içi geçiş durumunda

$$\langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle \approx \langle g_f | H' | g_i \rangle \quad (7.9)$$

terimi ile ilgilenilir. Kuantum kuyusunda bant içi geçişler için soğurma katsayısı

$$\alpha = \sum_i \sum_f \frac{\mu c m_e k_B T e^2}{\pi \hbar^2 m_0^2 L n_r w} (\cos^2 \theta) \cdot |M_{fi}|^2 \cdot \ln \left[\frac{1 + e^{\left[\frac{E_f - E_i}{k_B T} \right]}}{1 + e^{\left[\frac{E_f - E_f}{k_B T} \right]}} \right] \frac{\Gamma/2}{(\hbar\omega + E_f - E_i)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (7.10)$$

ile verilir. Burada matris elementi

$$M_{fi} = \frac{m_0(E_i - E_f)}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} g_f^*(z) z g_i(z) dz \quad (7.11)$$

şeklinde verilir. E_i ve E_f sırası ile i .nci ve f .nci alt bant enerjileri, μ geçirgenlik katsayısı, c ışığın boşluktaki hızı, k_B Boltzmann sabiti, T sıcaklık, θ , polarizasyon vektörü $\hat{\epsilon}$ ile kuyu normalisi arasındaki açı, n_r , kırılma indisi, E_F kuyudaki elektron yoğunluğuna bağlı olan Fermi enerjisi, Γ çizgi genişliğidir (line broadening). Kırılma indisi [56]

$$n_r^2 = A + B \left(\frac{\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} \right)$$

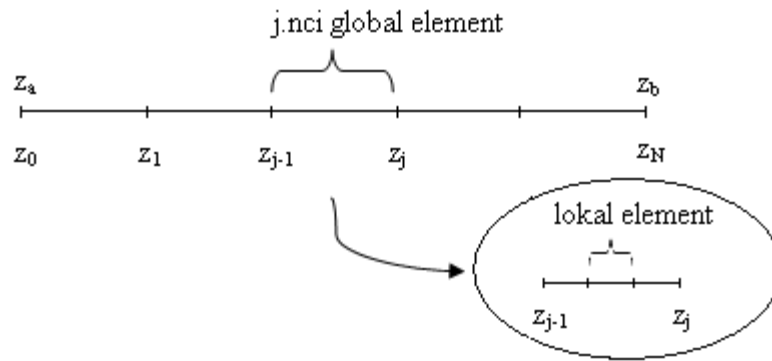
ile verilir ve $T = 298 K$ 'de $A = 8.950$, $B = 2.054$, $C^2 = 0.390$ 'dır. Hesaplamalarda $T = 300 K$, $E_F = 6.49 meV$ ($n_e = 1.6 \times 10^{17} cm^{-3}$), $\Gamma = 10 meV$ (deneysel sonuçlardan alınmıştır[57]). Ayrıca elektrik alan ve baskının değişiminden etkilenmediği düşünülmüştür). Soğurma katsayısı hesaplanırken gelen fotonun kuyuya dik polarize olduğu düşünülerek $\theta = 0$ alınmıştır.

$g(z)$ zarf fonksiyonu olmak üzere optiksel dipol matris elementi M_{fi} sonlu elemanlar yöntemi ile aşağıdaki şekilde hesaplandı.

Çalışma uzayımız $[z_a, z_b]$ aralığında tanımlı olsun. Bu aralıkta aşağıdaki integrali hesaplamak istiyoruz.

$$A_{fi} = \int_{z_a}^{z_b} dz \cdot g_f^*(z) \cdot z \cdot g_i(z) \quad (7.12)$$

Öncelikle çalışma uzayı $(N-1)$ tane global elemente bölünür. Daha sonra her bir global element $(n-1)$ tane lokal elemente bölünür. Yani, j .nci global elementte n tane nod oluşturulur.



Dolayısıyla (7.12) denklemindeki integral, j global element indisi olmak üzere

$$\int_{z_a}^{z_b} dz \rightarrow \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \quad (7.13)$$

şeklinde yazılır. Daha sonra j .nci global element ele alınır ve zarf fonksiyonları lokal element baz fonksiyonları cinsinden seriye açılır.

$$g(z) = \overline{N(z)}^T \cdot \bar{\phi} \quad g^*(z) = \overline{N(z)} \cdot \bar{\phi}^T \quad (7.14)$$

Burada $N(z)$ biçim fonksiyonlarını, ϕ ise nodal değerleri temsil eder. Buna göre (7.12) denklemi

$$\begin{aligned} A_{fi} &= \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \cdot \overline{N(z)} \cdot \bar{\phi}_f^T \cdot z \cdot \overline{N(z)}^T \cdot \bar{\phi}_i \\ &= \bar{\phi}_f^T \left[\sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \cdot \overline{N(z)} \cdot z \cdot \overline{N(z)}^T \right] \bar{\phi}_i \end{aligned} \quad (7.15)$$

şekline dönüşür. Buradan $[z_{j-1}, z_j]$ aralığı s dönüşümüyle $[0,1]$ aralığına götürülür ise,

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

olur. Dolayısıyla,

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

$$\int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \rightarrow L_j \int_0^1 ds$$

$$g_j(z) \rightarrow g_j(s) \quad (\text{j.nci global element zarf fonksiyonu})$$

elde edilir. Buradan,

$$A_{fi} = \bar{\phi}_f^T \left[\sum_{j=1}^N L_j \int_0^1 ds \cdot \overline{N(s)} \cdot (L_j s + z_{j-1}) \cdot \overline{N(s)}^T \right] \bar{\phi}_i$$

$$\begin{aligned}
&= \bar{\phi}_f^T \left[\sum_{j=1}^N L_j \left(\underbrace{L_j \int_0^1 ds \overline{N(s)} s \overline{N(s)}^T}_{\bar{m}_{e2}} + z_{j-1} \underbrace{\int_0^1 ds \overline{N(s)} \overline{N(s)}^T}_{\bar{m}_e} \right) \right] \bar{\phi}_i \\
&= \bar{\phi}_f^T \left[\sum_{j=1}^N L_j \left(L_j \bar{m}_{e2} + z_{j-1} \bar{m}_e \right) \right] \bar{\phi}_i \\
&\quad \quad \quad \bar{M} \\
&\quad \quad \quad A_{fi} = \bar{\phi}_f^T \bar{M} \bar{\phi}_i \tag{7.16}
\end{aligned}$$

elde edilir. Bu denklemdeki \bar{M} matrisi ile başlangıç ve son durumdaki $\bar{\phi}$ 'ler kullanılarak çiftlenimsiz bantlar için optiksel dipol matris elementi

$$M_{fi} = \frac{m_0(E_i - E_f)}{i\hbar} \bar{\phi}_f^T \bar{M} \bar{\phi}_i \tag{7.17}$$

şeklinde bulunur. Buradaki \bar{M} matrisi, $\bar{m} = L_j \left(L_j \bar{m}_{e2} + z_{j-1} \bar{m}_e \right)$ olmak üzere,

$$\bar{M} = \begin{bmatrix} \bar{m} & & & \\ & \bar{m} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \bar{m} \end{bmatrix}$$

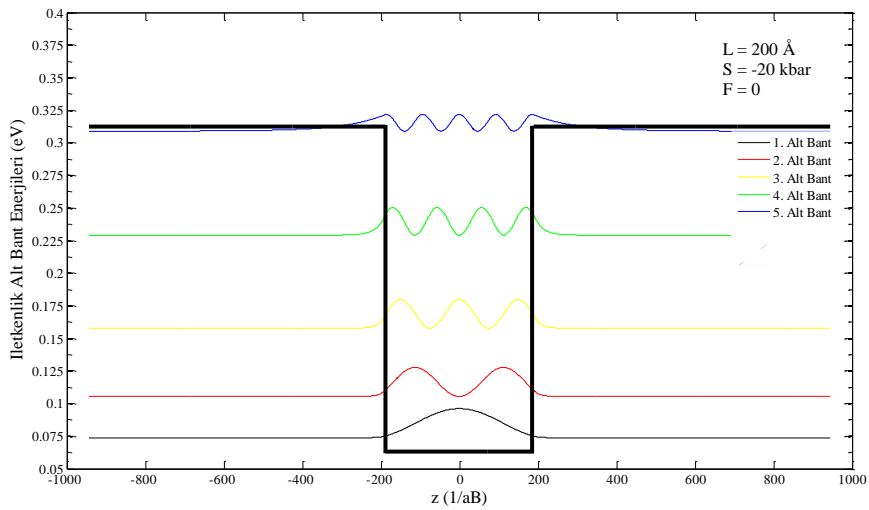
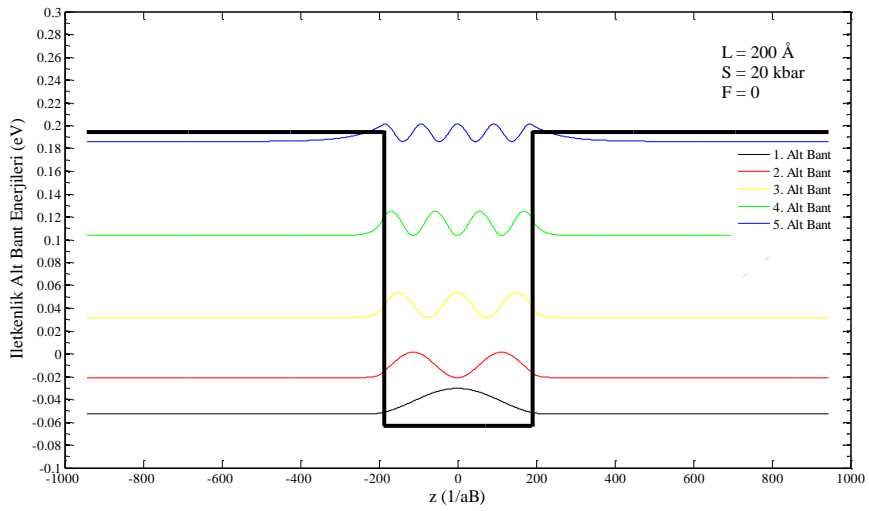
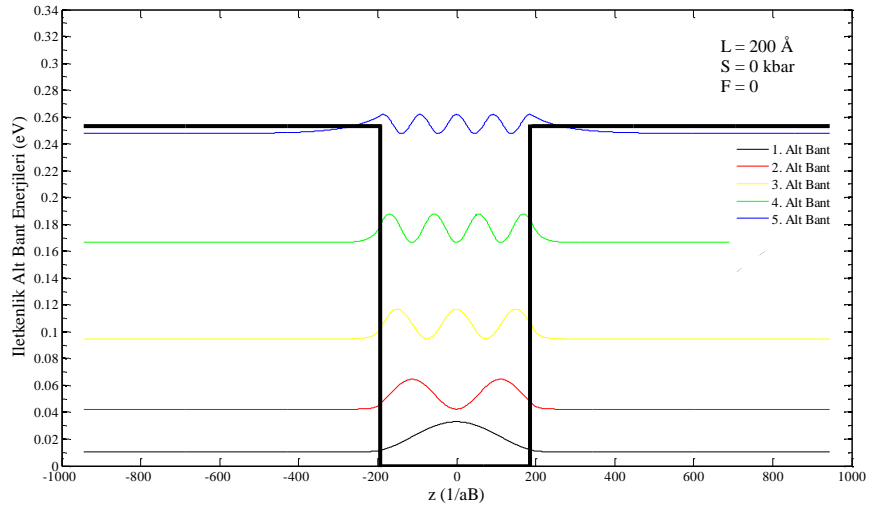
biçiminde oluşturulur. Yani, \bar{m} matrisi elde edildikten sonra \bar{M} matrisi içine gömülür ("kron"lanır).

Dolayısıyla optiksel dipol matris elementinin bulunmasıyla Şekil 7.1.'de şematik potansiyel profili verilen GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki bant içi geçişler için soğurma katsayısı denklem (7.10) ile hesaplandı.

Sonlu elemanlar yöntemi ile yapılan tüm hesaplamalarda global elementteki nod sayısı 4, toplam nod sayısı da 4000 olarak alındı. Ayrıca iletkenlik bandı enerji özdeğer ve özfonksiyonu hesaplamalarında kullanılan tüm fiziksel parametreler Ref. 39 ve Ref.40'tan, iletkenlik bandında bant içi soğurma katsayısı hesaplamalarında gerekli olan tüm fiziksel parametreler Ref. 58'den alındı.

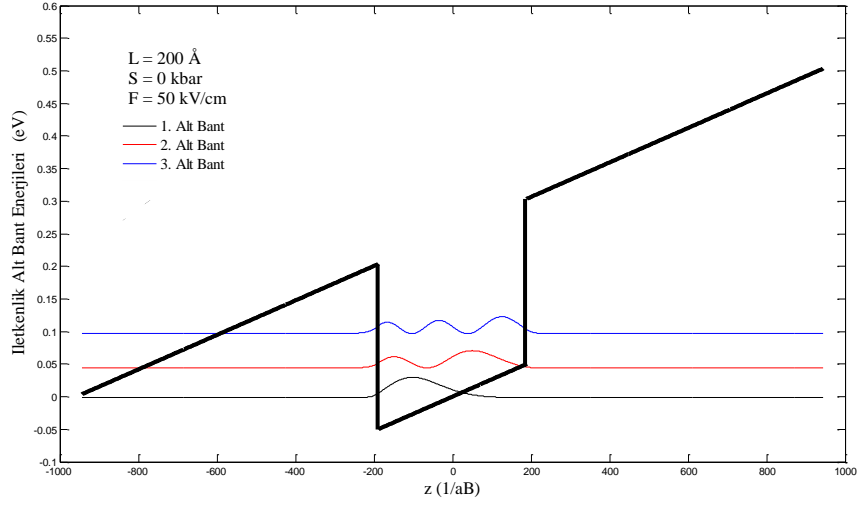
Şekil 7.2. (a), (b), (c)'de $F = 0$ için $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk beş enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi $S = 0$, $S = 20 \text{ kbar}$ ve $S = -20 \text{ kbar}$ için sırası ile verilmiştir. Bu şekiller incelendiğinde, alt bantların

enerji deęerleri ve kuyu potansiyeli deęeri, baskının pozitif veya negatif olmasına baęlı olarak enerji ekseninde artar veya azalır. Bu durum denklem (7.1)'deki Hamiltonianda baskı potansiyelini veren $a_C(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$ terimi ile açıklanabilir. Baskı pozitif iken zorlanma elemanlarının toplamı pozitif bir nicelik, a_C ise negatif bir sayı olduęundan $a_C(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$ çarpımı negatif bir nicelik verir. Örneęin, $S = 20$ kbar'lık baskı altında $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda $a_C(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) = -63.256 \text{ meV}$ 'dir. Kuyu potansiyeli ve alt bant enerjileri baskı pozitif iken bu negatif nicelik kadar enerji ekseninde ařaęıya (negatif yöne) kayar (řekil 7.2.(b)). Bu durumun tersi ise baskı negatif olduęunda meydana gelir. Yani, baskı negatif iken zorlanma elemanlarının toplamı negatif bir nicelik verir ve $a_C(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$ çarpımı pozitif bir nicelik olur. Dolayısıyla, kuyu potansiyeli ve alt bant enerjileri bu pozitif nicelik kadar enerji ekseninde yukarı (pozitif yöne) doęru kayar (řekil 7.2.(c)). $a_C(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$ çarpımı baskının doęrultusuna baęlı deęildir. Çünkü, belirli bir baskı büyüklüęü için hesaplanan $(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$ toplamı göz önüne aldıęımız beř farklı baskı doęrultusunda da deęiřmez.

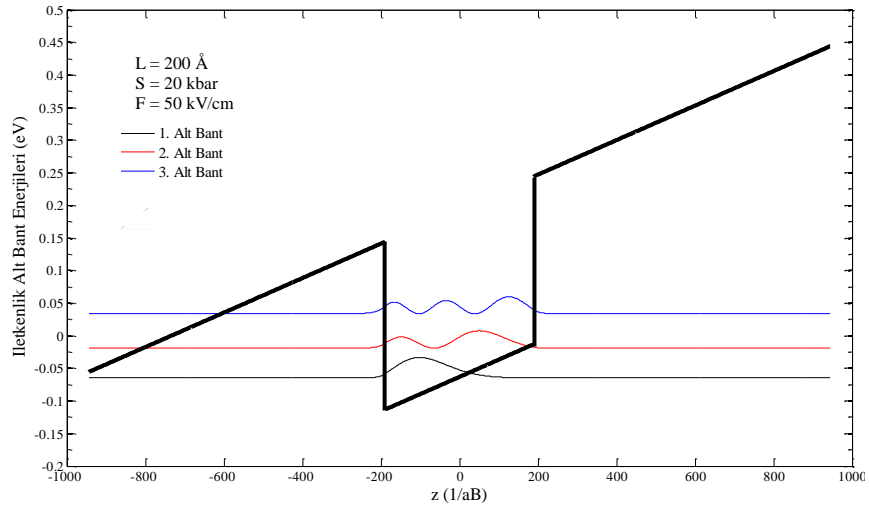


Şekil 7.2. $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki ilk beş enerji düzeyi ve bu düzeylere ait dalga fonksiyonlarının karesi; (a) $S = 0$ (Baskı yok iken), (b) $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde) ve (c) $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde).

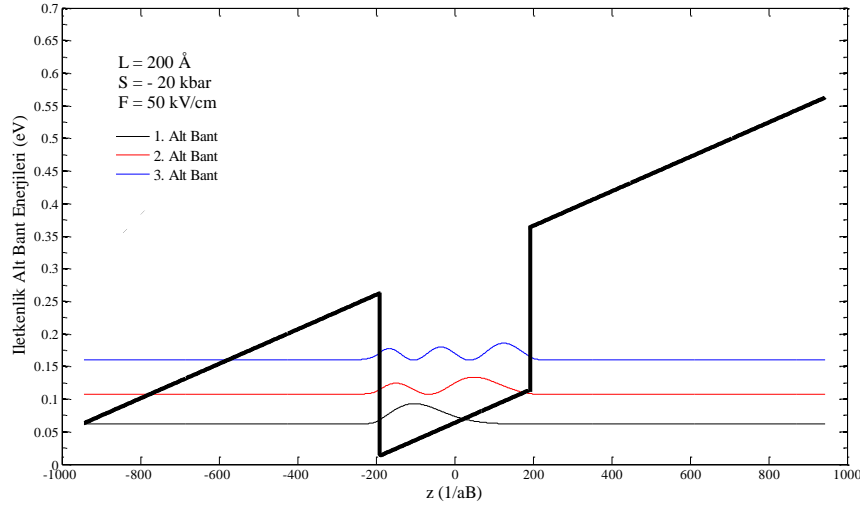
Şekil 7.3. (a), (b) ve (c)'de $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L = 200 \text{ \AA}$ genişliğindeki $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ tek kuantum kuyusundaki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi, $S = 0$, $S = 20 \text{ kbar}$ ve $S = -20 \text{ kbar}$ için sırası ile verilmiştir. Yapıya elektrik alan uygulandığı zaman elektronlar, alana zıt yönde sürüklenirler. Taban durumdaki elektronların alan etkisiyle kuyunun sol tarafında bulunma olasılığı üst uyarılmış düzeylerdeki elektronların bulunma olasılıklarından daha fazladır. Ayrıca, üst uyarılmış düzeylerdeki elektronların dalga fonksiyonları elektrik alanın yaratmış olduğu etkiyle oluşan üçgen potansiyel engelinden sızma olasılıkları taban durumunkinden oldukça fazladır. Bu davranış aynı zamanda elektro-optik cihazlar için önemli bir faktör olan, kuyu içinde bir bölgede yük birikiminin gerçekleştiğini göstermektedir. Kuantum kuyularında potansiyel engeli yük taşıyıcının $\pm\infty$ 'a kaçmasını önler ve lokalizasyonu koruyarak büyük enerji kaymalarının oluşmasını sağlar. Bu durum ekzitonik bağlanmanın verimliliğini ve önemini arttıran bir faktör olarak değerlendirilir [2, 51]. Bu etki temel alınarak hızlı modülatörler ve benzeri bir çok elektro-optik cihaz geliştirilmiştir [59, 60]. Taban durum dalga fonksiyonuna bakarak uygulanan bu büyük alan altında bile elektron taban durumunun iyi kuşatıldığı söylenebilir. Ayrıca alt bantlara ait enerjilerin baskıya bağlı davranışı Şekil 7.1.'deki gibidir. Buradaki farklılık baskıya bağlı kaymanın yanında alt bant enerjilerinin elektrik alanın etkisiyle değişmesindedir. Dolayısıyla $\text{GaAs}-\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ tek kuantum kuyusu sisteminde alt bant enerjileri için kuyu genişliği, elektrik alan ve baskı birer ayar parametresidir.



(a)

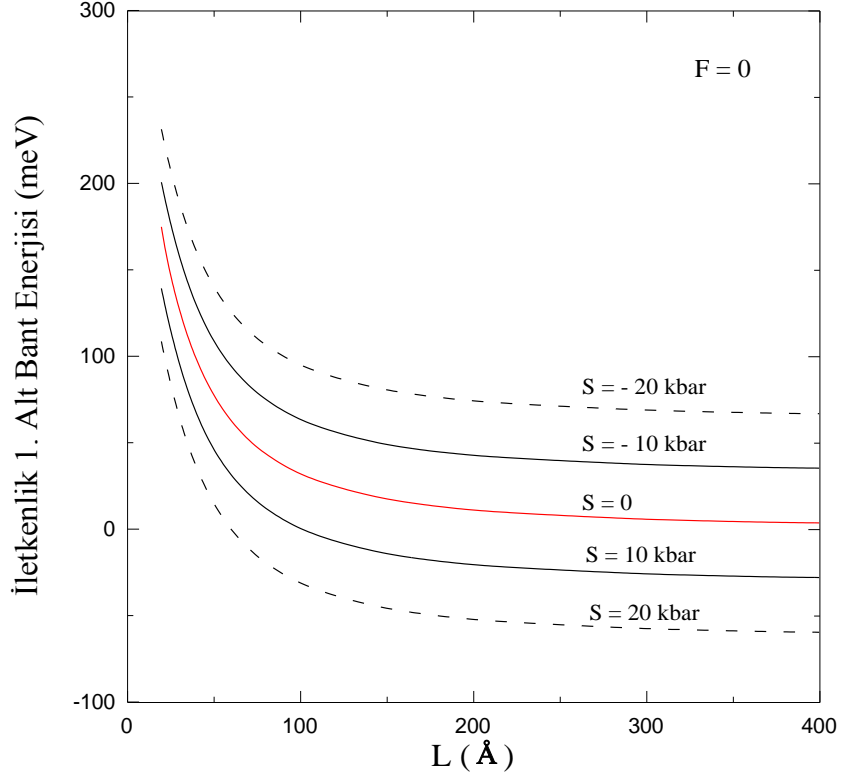


(b)

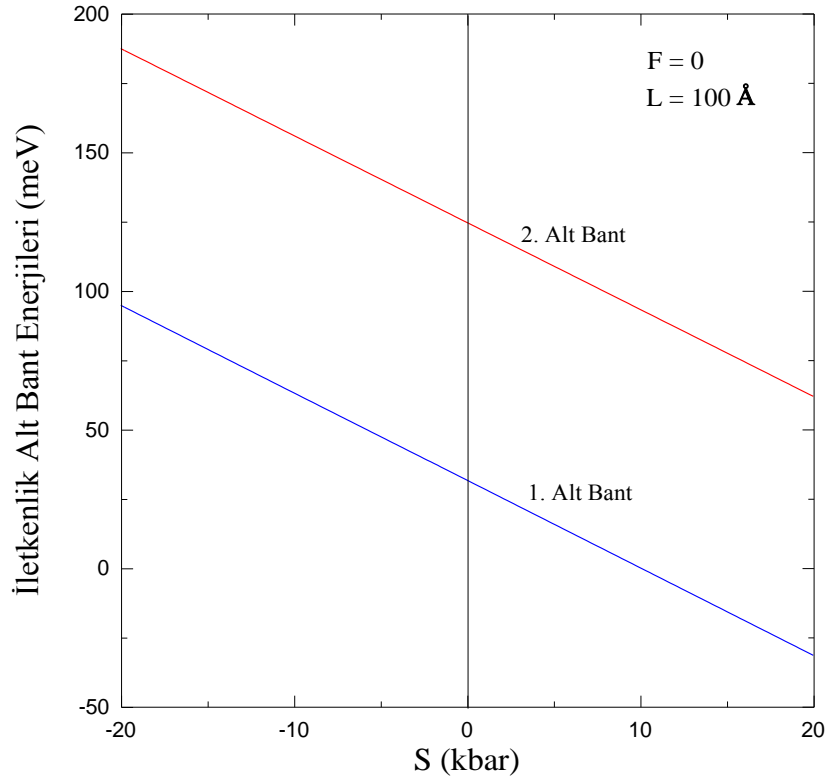


(c)

Şekil 7.3. $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değeri için $L=200 \text{ \AA}$ genişliğindeki $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki bağlı durum enerjileri ve bu enerjilere ait dalga fonksiyonlarının karesinin normalize konuma göre değişimi; (a) $S = 0$ (Baskı yok iken), (b) $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde), (c) $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde).



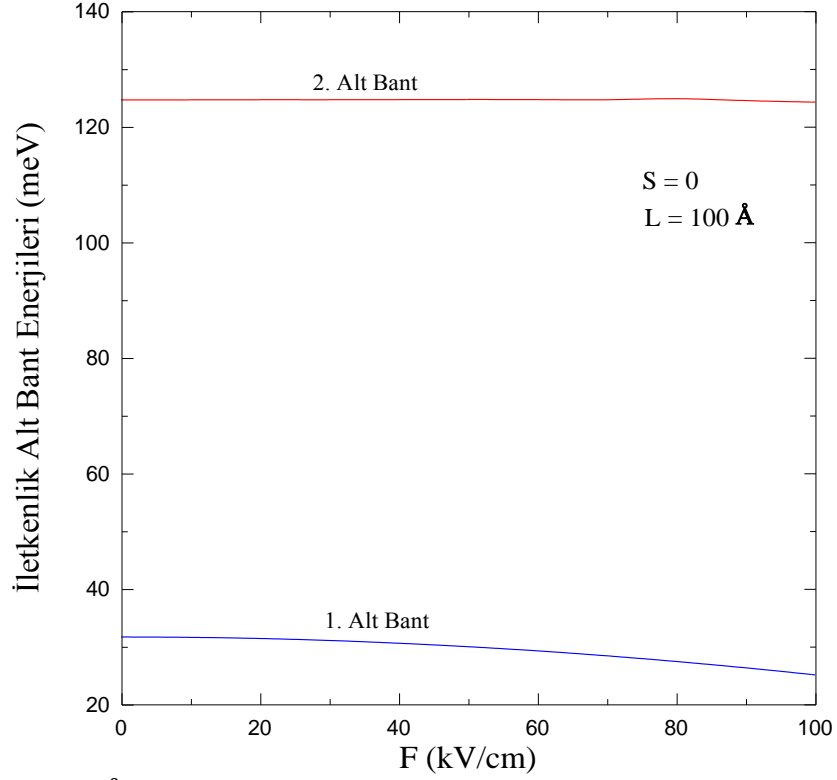
Şekil 7.4. *GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusundaki taban durum enerjisinin farklı baskı değerleri için kuyu genişliğine göre değişimi



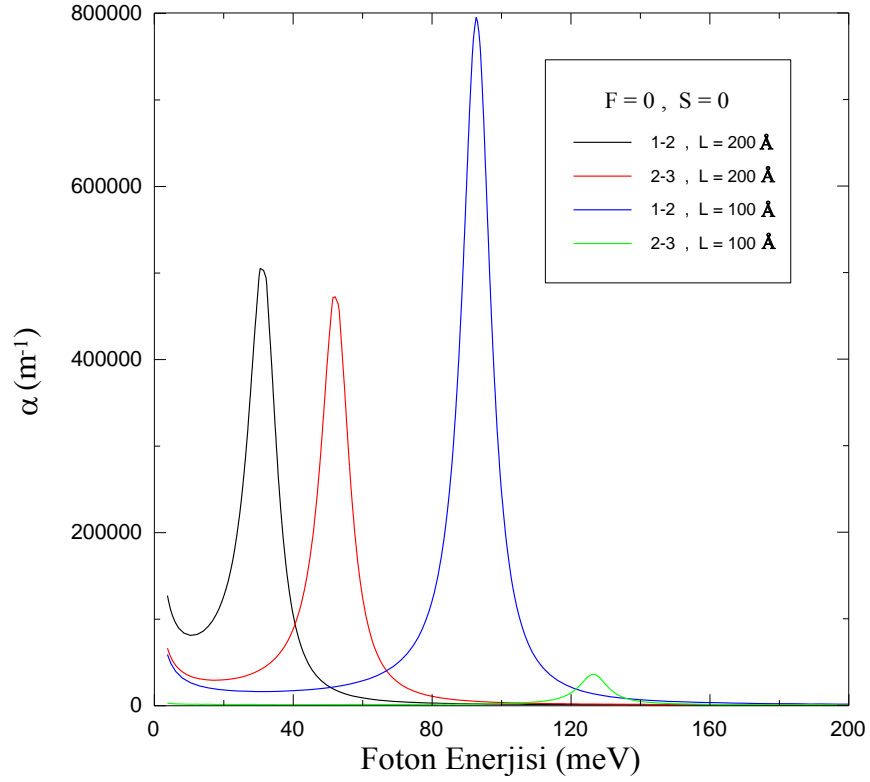
Şekil 7.5. $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk *GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunun ilk iki iletkenlik alt bant enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi

Şekil 7.4.'te uygulanan çeşitli baskı değerleri için $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandının taban durumu enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Bu grafiğe baktığımızda ilk göze çarpan davranış, taban durum enerjisi $L \cong 200 \text{ \AA}$ değerine kadar kuyu genişliğinin artmasıyla hızla azalır, $L \gtrsim 200 \text{ \AA}$ değerinden sonra taban durumu enerjisi sabit bir değere oturur. Bu davranış kuantum kuyularının temel özelliğidir. Ayrıca baskı arttıkça, baskı potansiyeli teriminden ($a_C(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$) dolayı taban durum enerjisi artar. Baskı potansiyelinin bu davranışını Şekil 7.5.'te daha açık bir biçimde görülmektedir. Şekil 7.5.'te $F = 0$ için $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk iki iletkenlik alt bant enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi verilmiştir. Buradan baskının büyüklüğü ile alt bant enerjileri arasında lineer bir ilişki olduğu görülmektedir. Birinci ve ikinci alt bant enerjilerinin baskı ile değişimi aynıdır. Bunun nedeni, uygulanan baskının tüm alt bantları aynı miktarda aşağıya veya yukarıya doğru kaydırmasıdır. Ayrıca ilk ve ikinci alt bant arasındaki enerji farkı baskı ile değişmemektedir, yani sabit kalmaktadır.

Şekil 7.6.'da baskının olmadığı durumda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk iki iletkenlik alt bant enerjilerinin elektrik alana göre değişimi verilmiştir. Taban durumu enerjisi elektrik alanın artmasıyla azalırken, ikinci durumun enerjisi elektrik alanın değişmesiyle neredeyse değişmemektedir. Elektrik alan arttıkça kuyu potansiyeli alana zıt yönde bükülmeye başlar ve elektron dalga fonksiyonu kuyunun sol tarafına süpürülerek orada lokalize olur. Dolayısıyla taban durumu enerjisi de azalmaktadır. İkinci enerji durumunda ise, kuyunun bükülmesi ile dalga fonksiyonunun kuyu dışına sızma olasılığı birinci duruma göre daha fazladır ve enerjisi potansiyel kuyusunun tabanındaki değişiminden çok fazla etkilenmez. Ayrıca ilk ve ikinci alt bant arasındaki enerji farkı elektrik alanın artmasıyla artmaktadır.



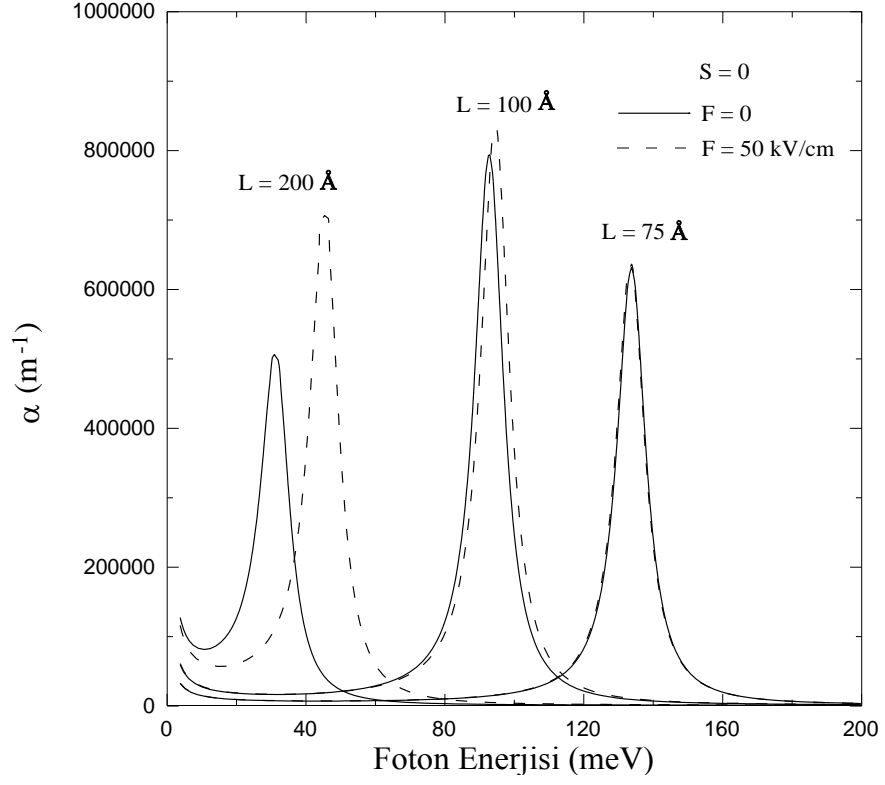
Şekil 7.6. $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk iki iletkenlik alt bant enerjisinin uygulanan elektrik alana göre değişimi



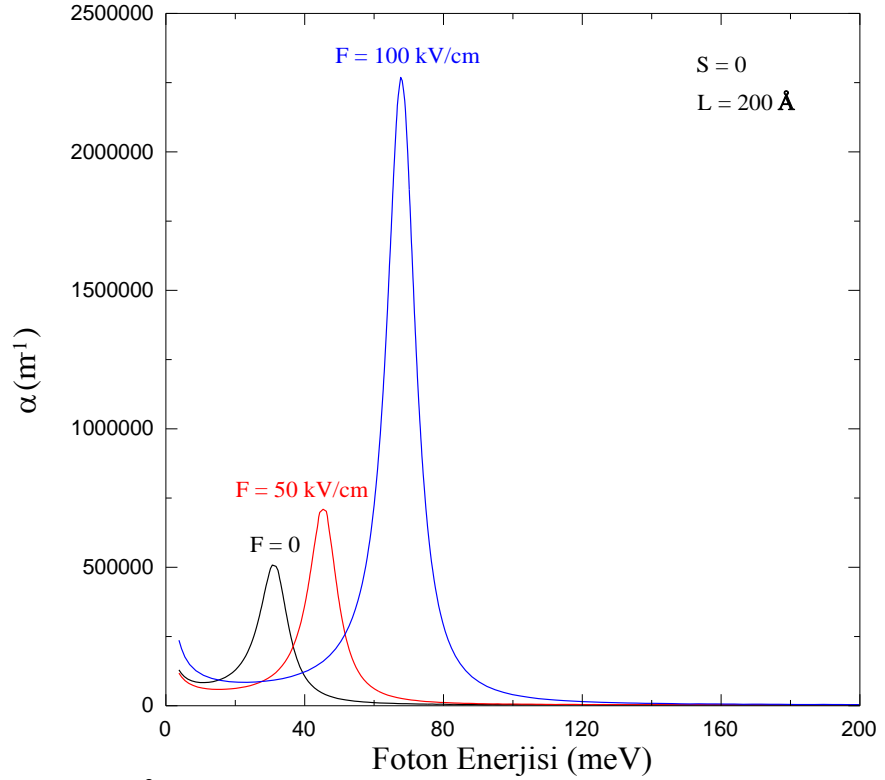
Şekil 7.7. $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi

Şekil 7.7.'de elektrik alan ve baskının olmadığı durumda $L = 100 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi verilmiştir. Her iki L değeri için 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait soğurma katsayısı genliklerine bakıldığında, 1-2 geçişi için bulunan soğurma katsayısı genliğinin değeri 2-3 geçişi için bulunandan büyüktür. Bu sonuca göre 1-2 geçişinin tüm L değerlerinde daha baskın olduğunu söylenilebilir. Ayrıca 2-3 geçişlerine ait soğurma piki enerjisi, 1-2 geçişlerinin pik enerjisi değerinden büyüktür. Bunun nedeni, 2-3 geçişlerinde başlangıç durumu ve son durum arasındaki enerji farkının 1-2 geçişine göre daha büyük olmasındandır. Burada dikkat çekici bir diğer nokta ise, $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu durumunda 1-2 ve 2-3 geçişlerine ait soğurma piki enerjileri $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk kuyu durumuna göre daha büyüktür. Bunun nedeni, dar kuyularda alt bantlar arasındaki enerji farkının geniş kuyulara göre daha büyük olmasıdır.

Şekil 7.8.'de elektrik alan altında $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyularında 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi farklı kuyu genişlikleri için verilmiştir. Burada $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için hesaplanan soğurma pikinin genliği, $L = 75 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk kuyular için hesaplanan soğurma pikinin genliğinden daha büyüktür. Bunun nedeni, matris elementinin (denklem 7.17) $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyuda daha büyük bir değer almasıdır. Matris elementi başlangıç ve son durum dalga fonksiyonlarının overlabına bağlıdır. Bu yüzden $L < 100 \text{ \AA}$ için dalga fonksiyonlarının bariyerlere sızma olasılığı artar ve başlangıç durumu ile son durum dalga fonksiyonlarının overlabı azalır. $L > 100 \text{ \AA}$ için de overlap azalır. Çünkü, elektron artık üç boyutlu karakter kazanmaya başladığı için elektrik alan etkisi büyük L değerlerinde oldukça belirgindir. Elektrik alan soğurma pikinin konumunun daha büyük enerjilere kaymasına ve genliğinin artmasına neden olur (özellikle $L > 75 \text{ \AA}$ değerleri için). Bu kayma kuantum kuşatma Stark etkisi olarak bilinir.

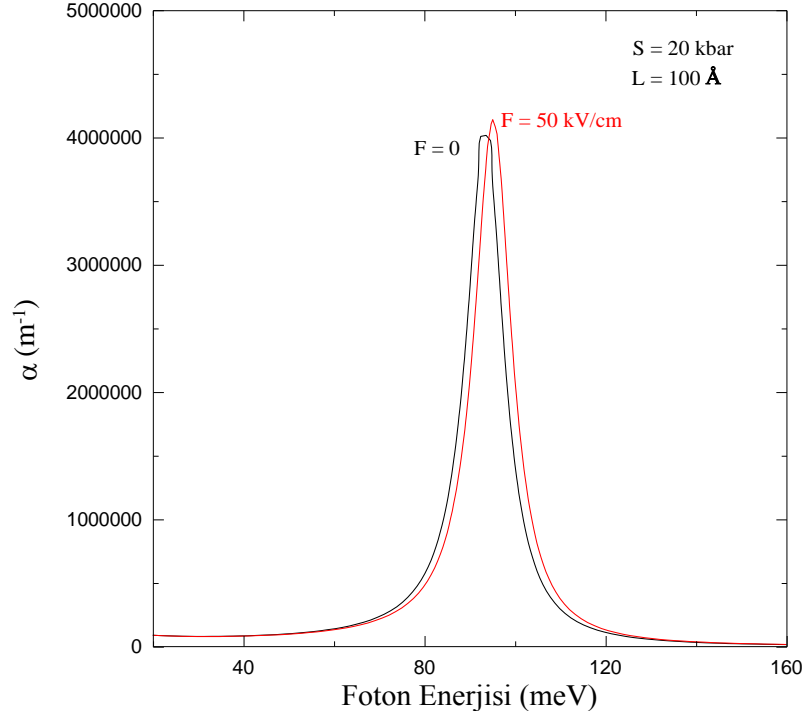


Şekil 7.8. Elektrik alan altında $L = 75 \text{ \AA}$, 100 \AA ve 200 \AA 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyularında 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi

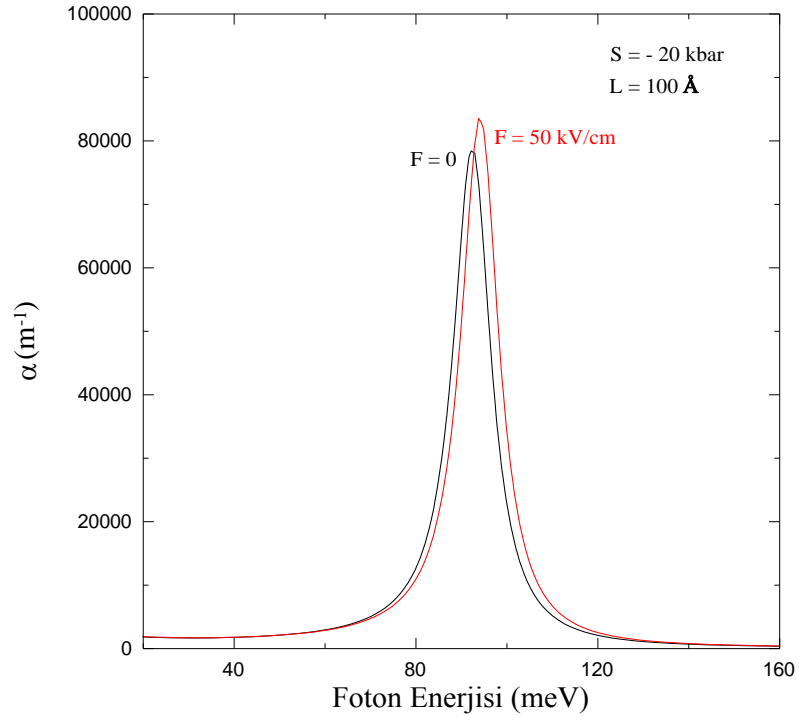


Şekil 7.9. $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusuna uygulanan farklı elektrik alan değerlerinde 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi

Şekil 7.9.'da $L = 200 \text{ \AA}$ 'lık $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi farklı elektrik alan değerleri için verilmiştir. Şekilden açıkça görüldüğü gibi alanın artmasıyla birlikte soğurma pikinin enerjisi ve genliği artmaktadır. Soğurma pikinin enerjisi ve genliği $F = 0$ 'da 31 meV ve $505\,554 \text{ m}^{-1}$ büyüklüğünde iken, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'de ise 68 meV 'de ve $2\,269\,140 \text{ m}^{-1}$ büyüklüğündedir. Dolayısıyla bu değerlere bakıldığında elektrik alanın 100 kV/cm 'ye arttırılması ile 37 meV 'lik kayma ve soğurma pikinde yaklaşık 4.5 kat artış görülmektedir. Ekziton soğurma ile bant içi soğurma karşılaştırıldığında iki farklı özellik olarak ortaya çıkar [2]. Soğurma pikinin enerjisinin artarak enerji ekseninde kayması kuantum kuşatma Stark etkisi diye bilinir. Bunun nedeni elektrik alanın artmasıyla ilk ve ikinci alt bant arasındaki enerji farkının artmasıdır. Ayrıca bant içi geçişlerde elektrik alan arttıkça soğurma pikinin genliğinin artmasının sebebi; elektrik alanın tüm durumlar için elektronları kuyunun aynı tarafına itmesi dolayısıyla alt bantlar arasındaki overlapi arttırmasıdır.



(a)



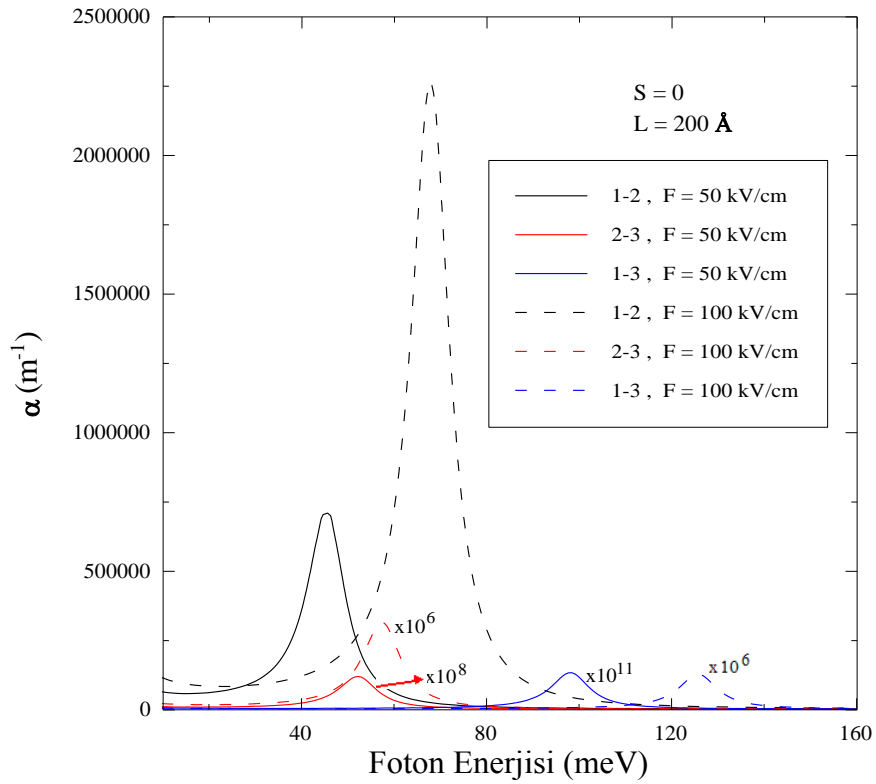
(b)

Şekil 7.10. Elektrik alanı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $\text{GaAs-Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi, (a) $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde) ve (b) $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde).

Şekil 7.10.'da elektrik alanı ve baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi, (a) $S = 20 \text{ kbar}$ (Baskı gerilme şeklinde) ve (b) $S = -20 \text{ kbar}$ (Baskı sıkıştırma şeklinde) için verilmiştir. Şekil 7.10. (a) ve (b)'ye bakıldığında uygulanan baskının soğurma pikinin enerjisini değiştirmeden sadece genliğini belirgin ölçüde değiştirdiği görülür. Baskının uygulanmasıyla alt bantlar arasındaki enerji farkının sabit kalmasından dolayı soğurma pikinin enerjisi değişmez ($F = 0$ için 93 meV). Uygulanan baskı alt bantların dalga fonksiyonlarını da etkilemediğinden, sözü edilen düzeye ait dalga fonksiyonları arasındaki overlap da değişmez. $F = 0$ durumunda $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği $4\,021\,470 \text{ m}^{-1}$ iken, $S = -20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği $78\,520.6 \text{ m}^{-1}$ 'dir. Baskı $S = 20 \text{ kbar}$ durumunda ilk ve ikinci alt bant enerji değerleri, $S = -20 \text{ kbar}$ durumundaki değerlerinden küçüktür. Pozitif baskı altında alt bant enerjileri enerji ekseninde aşağıya doğru kayarken (azalmaktadır), negatif baskı altında yukarıya doğru kayar (artmaktadır). Alt bant enerjilerindeki bu değişme denklem (7.10)'daki Fermi-Dirac dağılım fonksiyonunu içeren terimin $\left(\ln \left[\frac{1+e^{\left[\frac{E_F-E_i}{k_B T} \right]}}{1+e^{\left[\frac{E_F-E_f}{k_B T} \right]}} \right] \right)$ değişmesine neden olur. Yani, $S = 20 \text{ kbar}$ için bu terimin değeri $S = -20 \text{ kbar}$ için olan değerden yaklaşık 50 kat daha büyüktür, bu nedenle de soğurma pikinin genliği yaklaşık 50 kat daha büyüktür. Baskının yanında elektrik alanının da uygulanmasıyla soğurma pikinin genliği daha da artmaktadır. Aynı zamanda pikin enerjisi de artar. Bu sonuçlara bakarak bant içi geçişlerde baskı, elektrik alan ve kuyu genişliği birer ayar parametresidir denilebilir.

Şekil 7.11.'de elektrik alanı altında $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2, 2-3, 1-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi verilmiştir. Şekil incelendiğinde 1-2 geçişinin daha başat olduğu görülmektedir. Diğer geçişleri aynı şekilde gösterebilmek için soğurma pikleri çeşitli çarpanlarla çarpılmıştır. Burada önemli olan iki nokta vardır. Birincisi; $F = 0$ durumunda yasaklı olan 1-3 geçişinin elektrik alanının uygulanıp paritenin değişmesi ile artık izinli olmasıdır. İkincisi; $F = 50 \text{ kV/cm}$ 'lik alan değerinde 1-2 geçişi için bulunan soğurma piki enerjisi 2-3 geçişi için olandan küçük iken, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'lik alan değerinde 2-3 geçişi için bulunan soğurma piki enerjisi 1-2 geçişi için olandan küçüktür. Bunun nedeni; $F = 50 \text{ kV/cm}$ alan değerinde 1-2 geçişinde ilgili alt bantlar

arası enerji farkı 2-3 geçişi için olan enerji farkından küçük olması, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'lik alan değerinde ise 1-2 geçişinde ilgili alt bantlar arası enerji farkı 2-3 geçişi için olandan büyük olmasıdır [61]. Elektrik alanın artmasıyla soğurma piklerinin genliklerinin de arttığı açıkça görülmektedir.



Şekil 7.11. Elektrik alanı altında $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2, 2-3, 1-3 geçişlerine ait bant içi soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi.

8. ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNUN VALANS BANDI YAPISI

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

$$\left[\overline{\overline{H}} \left(\vec{k}_t, k_z = -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + (V_h(z) - eFz) \overline{\overline{I}} \right] \overline{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \overline{g}(z, \vec{k}_t) \quad (8.1)$$

şeklinde verilen etkin kütle eşitliği çözümlenerek bulunabilir. Burada $v_h(z)$, holler için kuantum kuyusunun kuşatma potansiyelidir ve

$$\overline{g}(z, \vec{k}_t) = \begin{bmatrix} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{N_c}(z) \end{bmatrix} \quad (8.2)$$

N_c tane çiftlenimli bandın zarf fonksiyonudur. Bu çalışmada Luttinger-Kohn Hamiltonianı, spin-orbit splitt-off bandının olmadığı durumda 4×4 , spin-orbit splitt-off bandı hesaba katılınca ise 6×6 büyüklüğünde bir matristir. Bu yüzden de N_c çiftlenimli band sayısı, 4×4 'lük matris durumunda 4, 6×6 'lık matris durumunda ise 6 olarak alındı. Hamiltonianın hermitliğini korumak ve heteroyapının arayüzeyindeki 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 $U_{QW}(z) = V_h(z) - eFz$ tanımı yapılırsa,

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \overline{\overline{H}}_A(z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \left(\overline{\overline{H}}_B(z) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{\overline{H}}_B(z) \right) + \overline{\overline{H}}_C(z) + U_{QW}(z) \overline{\overline{I}} \right] \overline{g}(z, \vec{k}_t) = E(\vec{k}_t) \overline{g}(z, \vec{k}_t) \quad (8.3)$$

denklemini elde edilir. Bu eşitlik çiftlenimli diferansiyel denklemleri içerdiğinden Sonlu Elemanlar Yöntemi (Finite Element Method) kullanılarak çözümlenir. Yukarıdaki özdeğer denklemi **Bölüm 6.4.**'te açık hali verilen Hamiltonian ve orada anlatılan yol izlenerek

$$G = \bar{U}^T (\bar{K} - E\bar{M}) \bar{U} \quad (8.4)$$

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

$$\frac{\partial G}{\partial \bar{U}^T} = 0 \quad \bar{K}\bar{U} - E\bar{M}\bar{U} \quad (8.5)$$

denklemini çözüldü. Bu bir özdeğer denklemidir ve buradaki özdeğer ve özfonksiyonlar bilinmemektedir. Genelde \bar{K} ve \bar{M} sparse bantlı Hermitien matrislerdir.

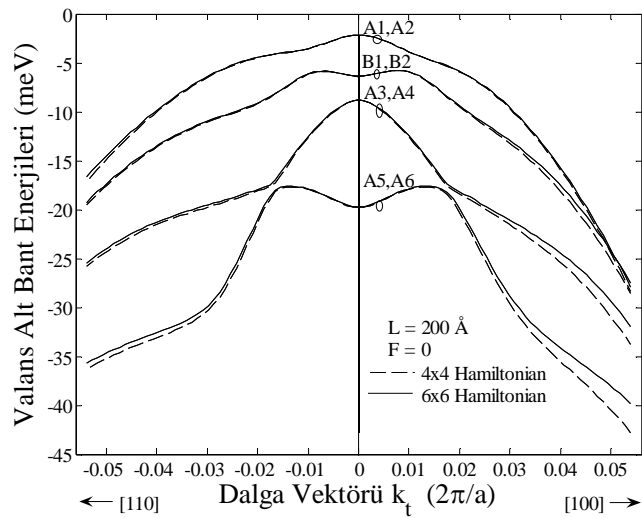
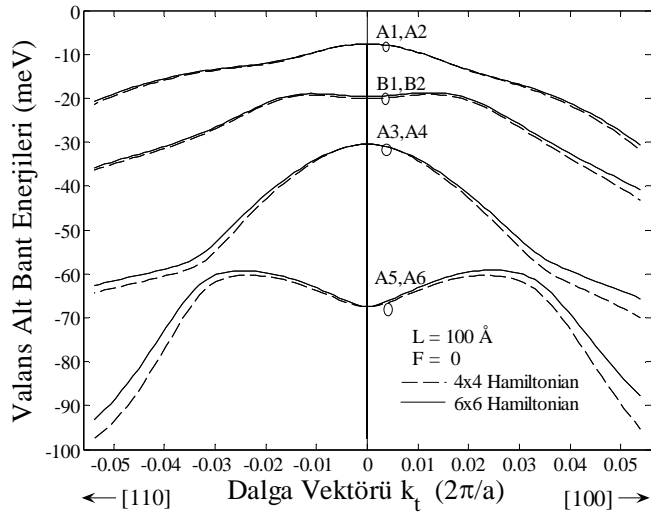
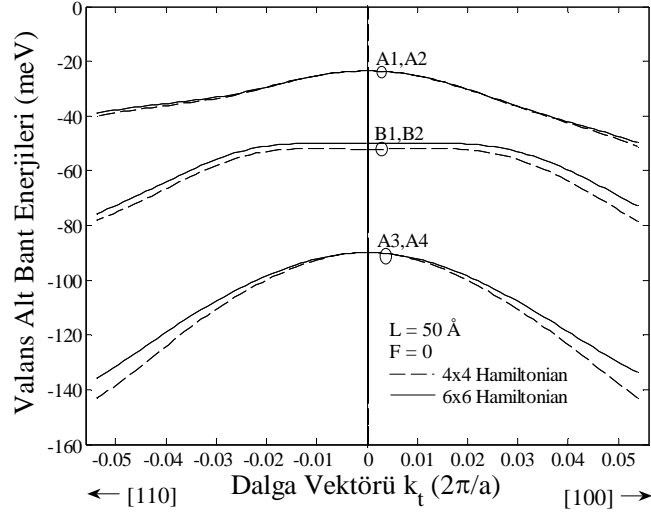
Yukarıdaki formulasyon elektrik alan ve baskı altında *GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunun valans bant yapısına uygulandı ve sonuçta elde edilen denklem MATLAB paket programı ile çözümlenerek kuantum kuyusunun öz değer ve öz fonksiyonları bulundu. Hesaplamalarda global elementteki nod sayısı 4, toplam nod sayısı da 4000 olarak alındı. Bu değerler ile hata miktarımız çok küçüktür (~ 0.001 meV). Ayrıca hesaplamalarda kullanılan fiziksel parametreler Ref. 39 ve Ref. 40'den alındı.

Şekil 8.1. (a), (b) ve (c)'de $F = 0$ durumunda *GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunun valans bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_t 'ye göre değişimi $L = 50$ Å, $L = 100$ Å ve $L = 200$ Å kuyu genişlikleri için sırası ile verilmiştir. Bütün şekillerde kesikli çizgiler ile spin orbit çiftleniminin ihmal edilmiş olduğu durum yani, 4×4 'lük Luttinger-Kohn Hamiltonianı ile elde edilen sonuçlar; sürekli çizgilerle ise spin orbit çiftleniminin olduğu durum yani, 6×6 'lık Luttinger-Kohn Hamiltonianı ile elde edilen sonuçlar gösterilmiştir. $k_t = 0$ 'daki karakterlere göre alt bantlar "ağır boşluk" (HH), "hafif boşluk" (LH) ve "spin orbit boşluk" (SO) bandı şeklinde adlandırılabilir, fakat $k_t \neq 0$ 'da herhangi bir enerji düzeyine sadece HH (veya LH veya SO) bandı denilemez. Çünkü, k_t değiştikçe her karakterden farklı oranda katkı gelmektedir ve bu oranlara bakılarak o k_t değerinde alt bant enerjisinin ağırlıklı olarak hangi karakteri taşıdığı söylenebilir. Bu yüzden biz alt bantlarımızı $k_t = 0$ 'daki ağırlıklı karakterine göre A, B ve C sınıfı bant şeklinde isimlendirdik. Buna göre; ilgili alt bant $k_t = 0$ 'da HH ağırlıklı ise sırasıyla A1, A2, A3,.. şeklinde; alt bant $k_t = 0$ 'da LH ağırlıklı ise sırasıyla B1, B2, B3,.. şeklinde; alt bant $k_t = 0$ 'da SO ağırlıklı ise sırasıyla C1, C2, C3,.. şeklinde adlandırdık. $k_t \neq 0$ için HH, LH ve SO karakterlerinin karışımı arttığından valans bandı yapısının parabolikliği bozulur. Bütün k_t değerlerinde elektrik alanı yok iken, 4×4 'lük ve 6×6 'lık Hamiltonianlar iki katlı dejener enerji düzeylerini

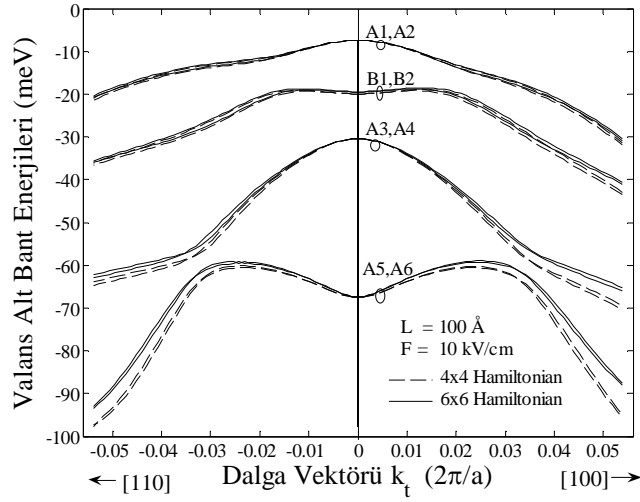
verir. Bant kenarında ($k_t = 0$ 'da) B1 ve B2'nci alt bant enerjileri dışındaki enerjiler çiftlenimsizdir ve spin orbit çiftleniminden etkilenmemektedir. Çünkü, bu enerjiler %100 HH karakterine sahip bantın alt bant enerjileridir. B1 ve B2'nci alt bant enerjileri LH karakterine sahip bantların alt bant enerjileri olduğundan spin orbit çiftleniminden etkilenmektedir.

Şekil 8.1.'den de görüldüğü gibi $k_t = 0$ 'da B1 ve B2'nci enerji düzeyleri spin orbit çiftlenimi var iken daha yukarıdadır. Ayrıca, sonlu k_t değerlerinde ($k_t \neq 0$) tüm alt bantlar spin orbit çiftleniminden etkilenirler. $k_t \neq 0$ değerlerinde spin orbit etkileşmesi içeren (sürekli çizgiler) bütün alt bantların enerjileri spin orbit etkileşmesi içermeyen (kesikli çizgiler) alt bantların enerjilerinden büyüktür. Bu genel davranış rastlantı değildir. Çünkü, kuantum mekaniksel düzey itmesinin (quantum-mechanical level repulsion) direkt bir sonucudur [38]. Bu yüzden, altta bulunan alt bant enerjilerinin yukarıda bulunan alt bant enerjilerine göre daha fazla spin orbit çiftleniminden etkilendiği görülmektedir. Ayrıca Şekil 8.1.'e 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 8.1.'deki 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.

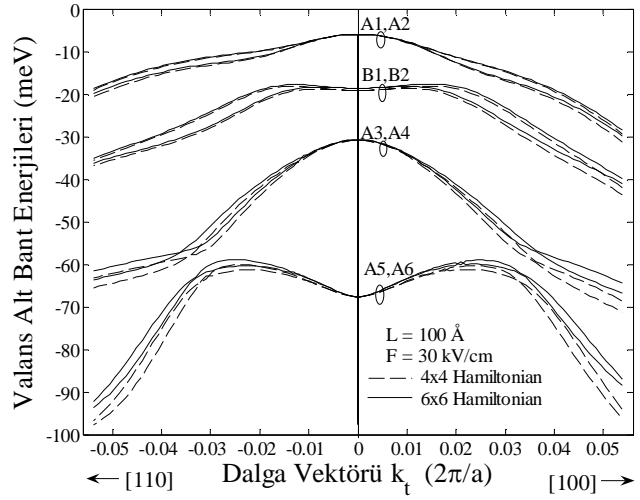
Şekil 8.2.'de $L = 100 \text{ \AA}$ kuyu genişliğine sahip $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun (a) $F = 10 \text{ kV/cm}$, (b) $F = 30 \text{ kV/cm}$ ve (c) $F = 50 \text{ kV/cm}$ elektrik alan değerleri için valans bant yapısının düzlemdeki dalga vektörü k_t 'ye göre değişiminin sonuçları verilmiştir. Bütün k_t değerlerinde elektrik alanı yok iken, 4×4 'lük ve 6×6 'lık Hamiltonianlar iki katlı dejenere enerji düzeyleri verirken elektrik alanı uygulandığında, $k_t \neq 0$ değerlerinde inversiyon simetrisi kırıldığından dejenere olan alt bantlar ayrılır. Bu spin dejenerasyonunun kalkması inversiyon simetrisinin olmamasından ve spin orbit çiftleniminin varlığından dolayıdır. Ayrıca şekle dikkatli bakıldığında, elektrik alanın artması ile alt bantlar arasındaki enerji farkının da arttığı görülmektedir.



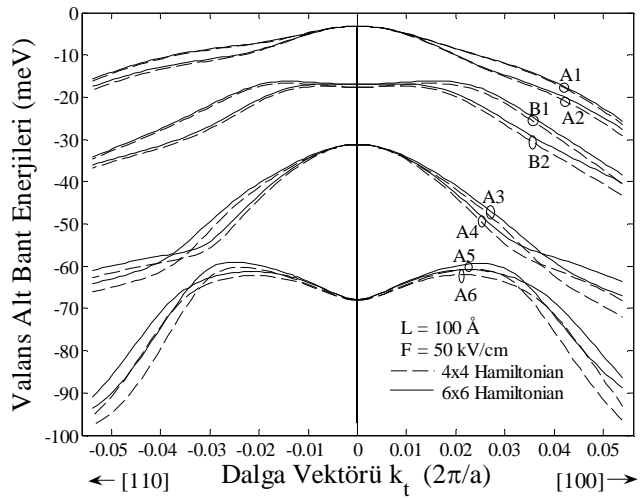
Şekil 8.1. *GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $L = 50 \text{ \AA}$, (b) $L = 100 \text{ \AA}$ ve (c) $L = 200 \text{ \AA}$.



(a)



(b)

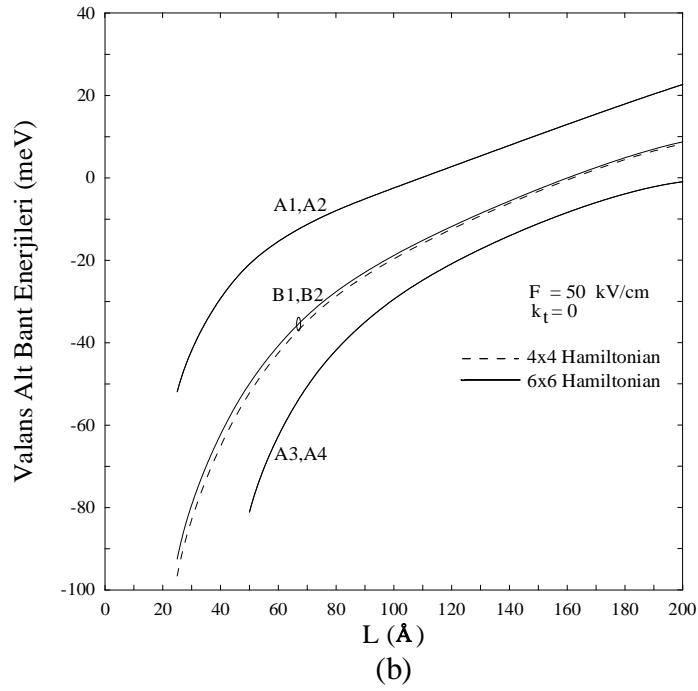
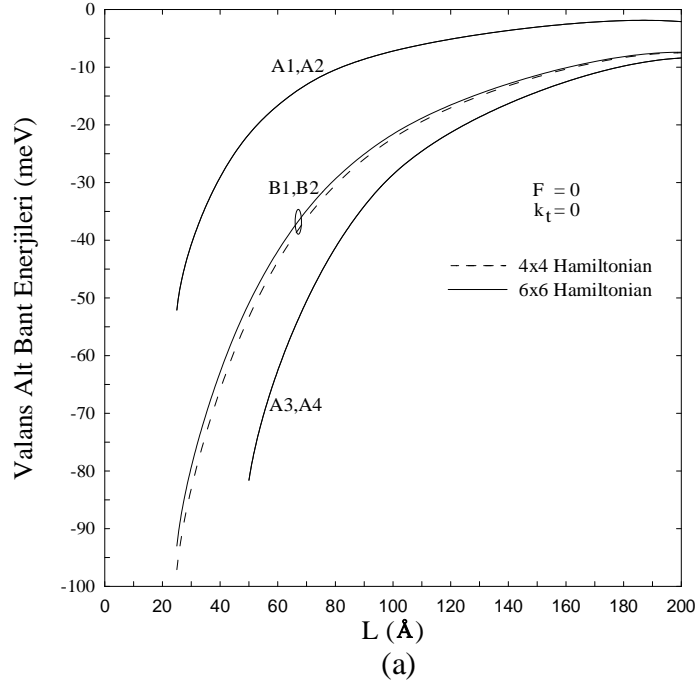


(c)

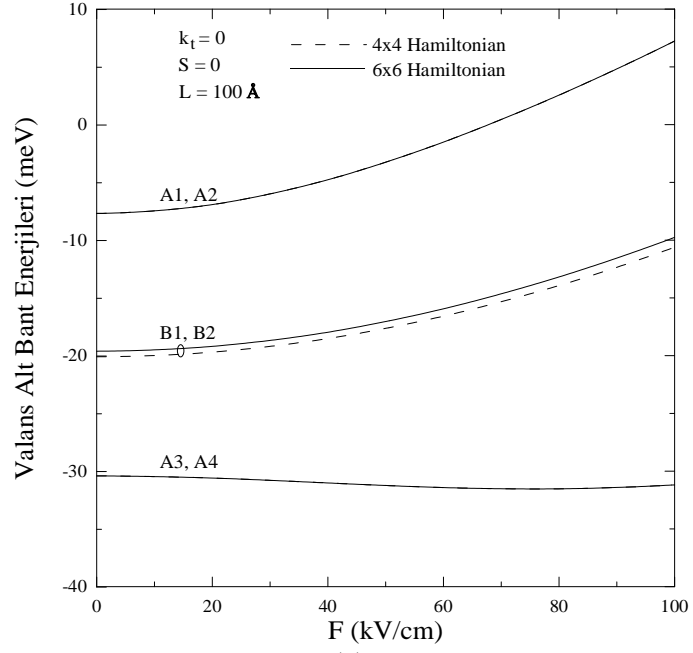
Şekil 8.2. $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $F = 10 \text{ kV/cm}$, (b) $F = 30 \text{ kV/cm}$ ve (c) $F = 50 \text{ kV/cm}$.

Şekil 8.3.'te $k_t = 0$ 'da $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk altı valans alt bant enerjisinin kuyu genişliği ile değişimi (a) $F = 0$ ve (b) $F = 50 \text{ kV/cm}$ için verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, alan yok iken (Şekil 8.3. (a)) kuyu genişliğinin artmasıyla valans bandındaki alt bant enerji değerleri yukarı doğru kayarak kuyu tabanına yaklaşır. Dolayısıyla alt bant enerji düzeyleri arasındaki fark azalmaktadır. Alan uygulandığında (Şekil 8.3. (b)) davranış değişmemekle birlikte alt bant enerjilerindeki değişim alan uygulanmamış duruma göre daha büyüktür. Örneğin, $F = 0$ durumunda A1, A2 enerji düzeyi kuyu genişliği 20 \AA 'dan 200 \AA 'a arttığında yaklaşık olarak $\sim 50 \text{ meV}$ değişir. Fakat, $F = 50 \text{ kV/cm}$ durumunda ise A1, A2 enerji düzeyi $\sim 75 \text{ meV}$ değişir.

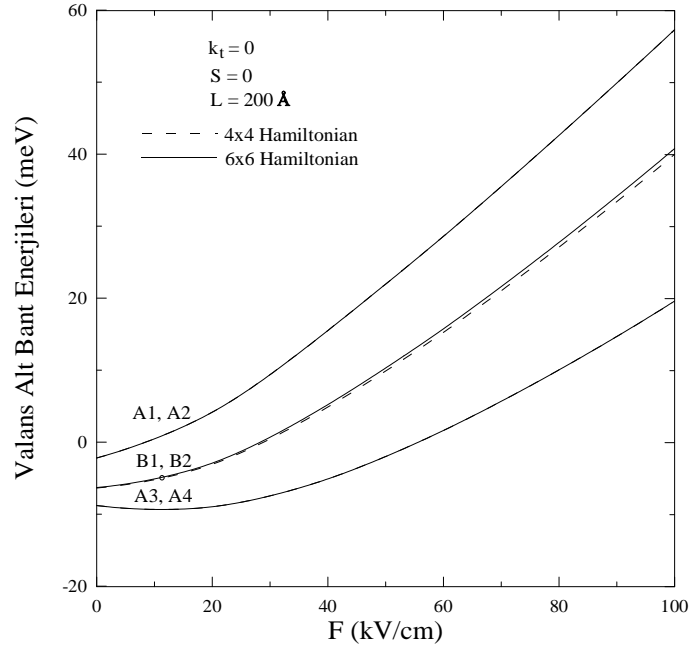
Şekil 8.4.'te $k_t = 0$ 'da $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk altı valans alt bant enerjisinin elektrik alanla değişimi (a) $L = 100 \text{ \AA}$ ve (b) $L = 200 \text{ \AA}$ için verilmiştir. Şekil 8.4.(a)'ya bakıldığında, $k_t = 0$ 'da artan elektrik alanla A1, A2, B1, B2 enerji düzeylerinin değerleri artar. Buna karşın A3, A4 enerji düzeyleri ise alandan hemen hemen etkilenmezler. Şekil 8.4.(b)'de ise, tüm enerji düzeylerinin değerleri elektrik alanın artmasıyla artar. Bu davranış kuantum kuşatma Stark etkisi olarak bilinir [2]. $L = 100 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk kuyuların alt bant enerjilerinin elektrik alanla değişim miktarları birbirinden farklıdır. Örneğin, elektrik alanın 0 'dan 100 kV/cm 'ye çıkması ile $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için A1, A2 alt bant enerjisi yaklaşık 15 meV artarken, $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için A1, A2 alt bant enerjisi yaklaşık olarak 60 meV artmaktadır. Ayrıca burada daha önce de belirtildiği gibi, 4×4 'lük Luttinger-Kohn Hamiltonianı yerine 6×6 'lık Hamiltonian kullanıldığında alt bant enerjilerinden sadece B sınıfı banda ait alt bantlar değişime uğrar. Bu değişim dar kuyularda geniş kuyulardakine oranla daha fazla görülmektedir.



Şekil 8.3. $k_t = 0$ 'da $L = 100$ Å'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin kuyu genişliğine göre değişimi (a) $F = 0$ ve (b) $F = 50$ kV/cm.



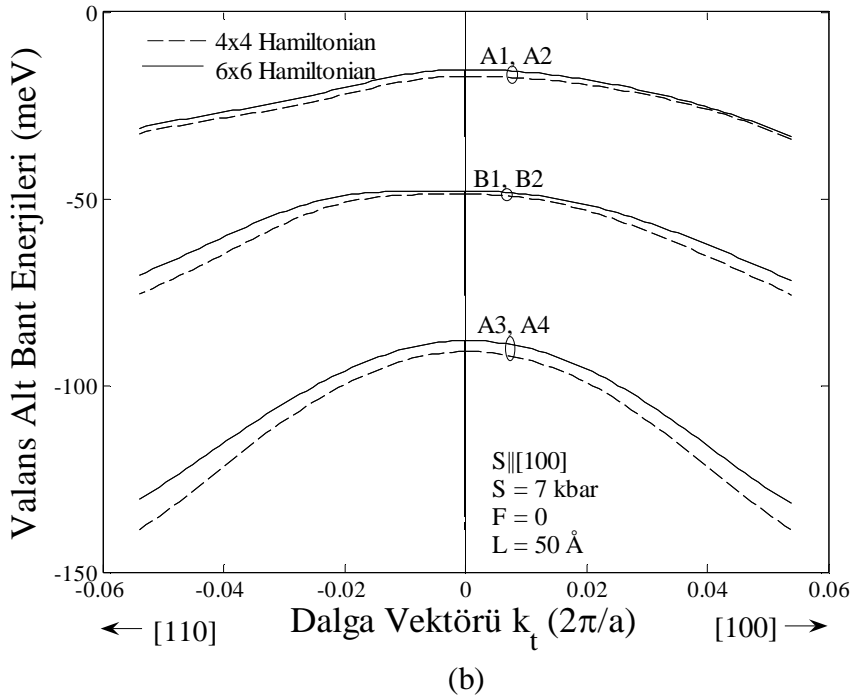
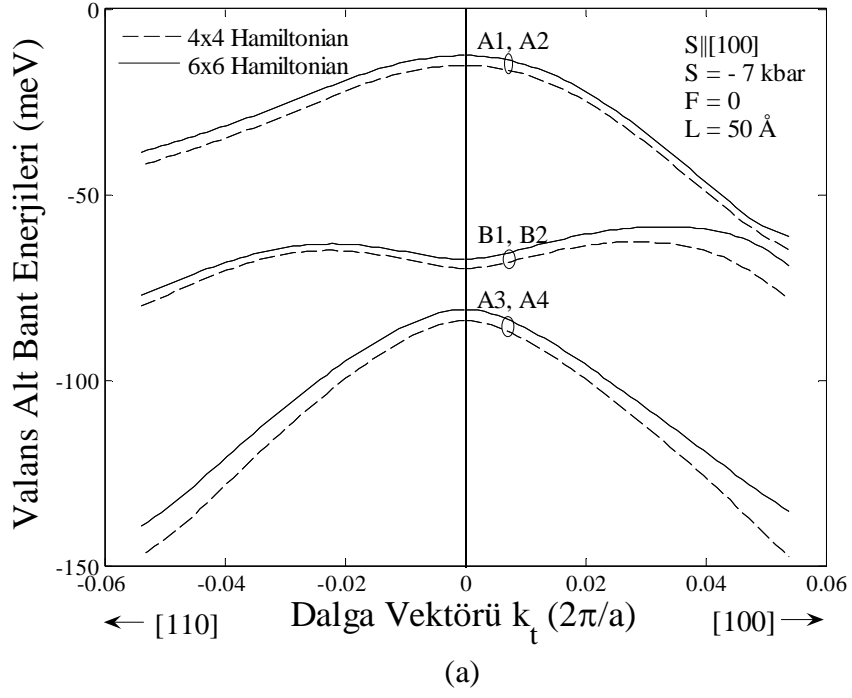
(a)



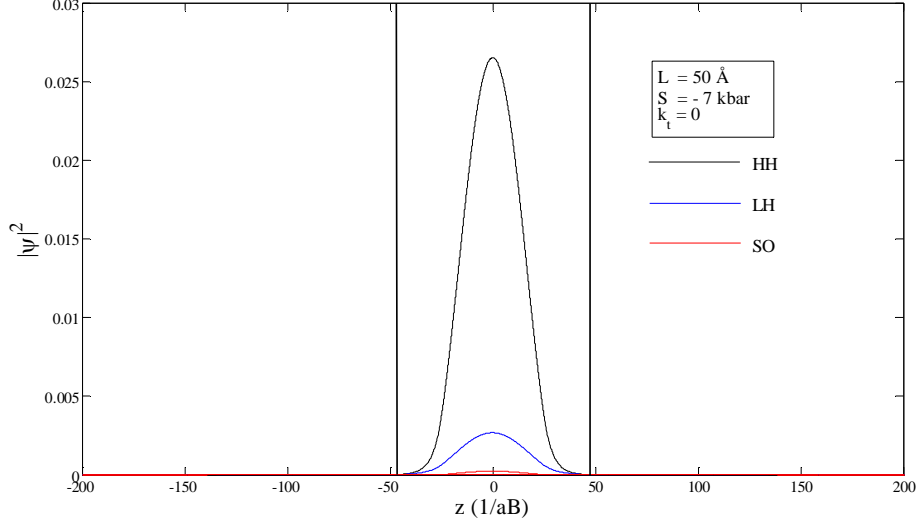
(b)

Şekil 8.4. $k_t = 0$ 'da $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin elektrik alana göre değişimi (a) $L = 100 \text{ \AA}$ ve (b) $L = 200 \text{ \AA}$.

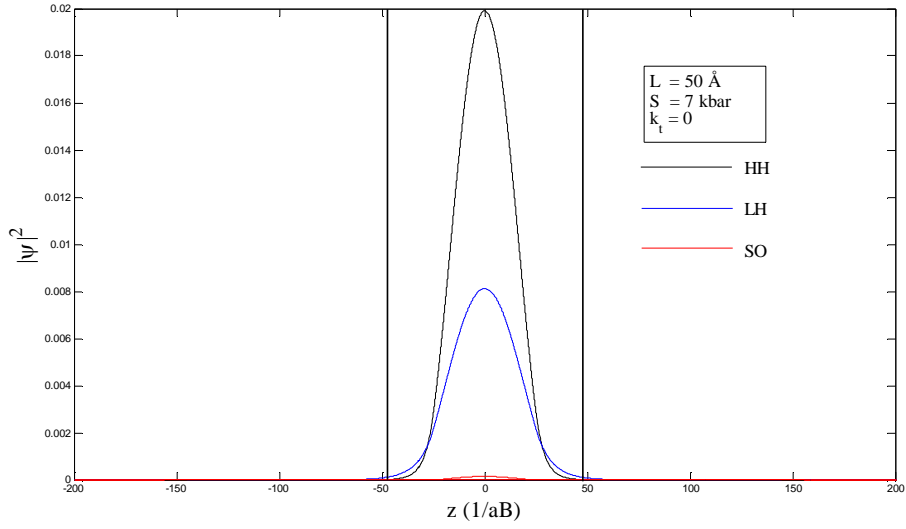
$S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi $S = -7$ kbar için Şekil 8.5.(a)'da, $S = 7$ kbar için Şekil 8.5.(b)'de verilmiştir. $k_t = 0$ 'da baskı yok iken A sınıfı alt bantlar spin yörünge bandından etkilenmezken B sınıfı alt bantlar spin yörünge bandından etkilenmekte idi (Şekil 8.1.(a)). Şekil 8.5.'e bakıldığında, baskının uygulanması ile A sınıfı alt bantların da artık spin orbit bandından etkilendiği görülmektedir. Bunun nedeni, $k_t = 0$ 'da Luttinger Kohn Hamiltonian'ında baskının uygulanması ile diagonal olmayan terimlerin sıfırdan farklı olması ve bu terimlerin A sınıfı alt bant enerjilerine katkı vermesidir. $S = -7$ kbar'lık baskı altında A1, A2 alt bantları ile B1, B2 alt bantları arasındaki enerji farkı artmaktadır. Ayrıca, A sınıfı alt bantlar yukarı doğru kayarken, B sınıfı alt bantlar aşağıya doğru kaymaktadır. $S = -7$ kbar'lık baskı altında ise, A1, A2 alt bantları ile B1, B2 alt bantları arasındaki enerji farkı azalmaktadır. Ayrıca bu durumda A sınıfı alt bantlar aşağıya doğru kayarken, B sınıfı alt bantlar yukarıya doğru kaymaktadır. Burada belirtilmesi gereken diğer bir nokta ise; baskının uygulanması ile alt bantlar $k_t = 0$ 'da dahi sadece HH (veya LH, veya SO) karakterine sahip değildir. Dolayısıyla alt bantlar $k_t = 0$ 'da HH, LH, SO karakterlerinin farklı oranlardaki karışımına sahiptir. Bu yüzden $S||[100]$ uygulanan baskı altındaki $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bantlarını $k_t = 0$ 'da dahil olmak üzere HH1, LH1 gibi simgelerle tanımlamak uygun değildir. Bunun yerine ilgili alt banttaki tüm karakterlerden gelen katkılar hesaplanıp ağırlıklı karakterlerine göre tanımlama yapılmalıdır. Örneğin, $S = -7$ kbar'lık baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk kuyuda birinci alt bant %89 ($HH \uparrow + HH \downarrow$), %10.22 ($LH \uparrow + LH \downarrow$) ve %0.78 ($SO \uparrow + SO \downarrow$) karakteri taşıdığından ve bu alt bant çift katlı dejenere olduğu için A1, A2 alt bantı şeklinde isimlendirildi. $S = 7$ kbar'lık baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk kuyuda birinci alt bant %67.16 ($HH \uparrow + HH \downarrow$), %32.36 ($LH \uparrow + LH \downarrow$) ve %0.48 ($SO \uparrow + SO \downarrow$) karakteri taşıdığından ve bu alt bant çift katlı dejenere olduğu için A1, A2 alt bantı şeklinde isimlendirildi. Bu örneklere ait dalga fonksiyonu grafikleri Şekil 8.6.'da verilmiştir. Burada 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonianı kullanıldığı için $|\Psi|^2 = |\Psi_{HH}|^2 + |\Psi_{LH}|^2 + |\Psi_{SO}|^2 = 1$ dir. 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı olması durumunda ise $|\Psi|^2 = |\Psi_{HH}|^2 + |\Psi_{LH}|^2 = 1$ ile verilir.



Şekil 8.5. $S \parallel [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$.

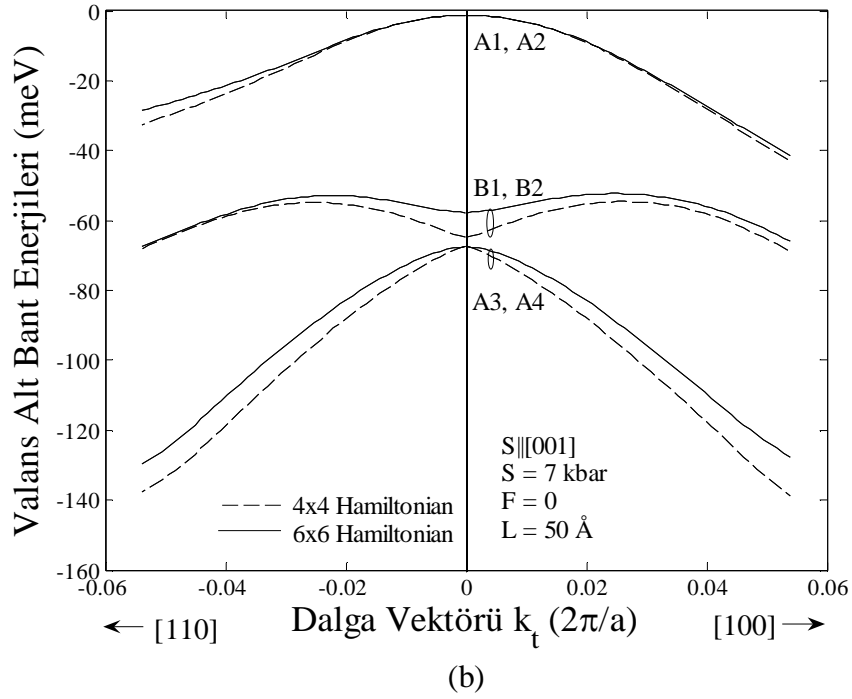
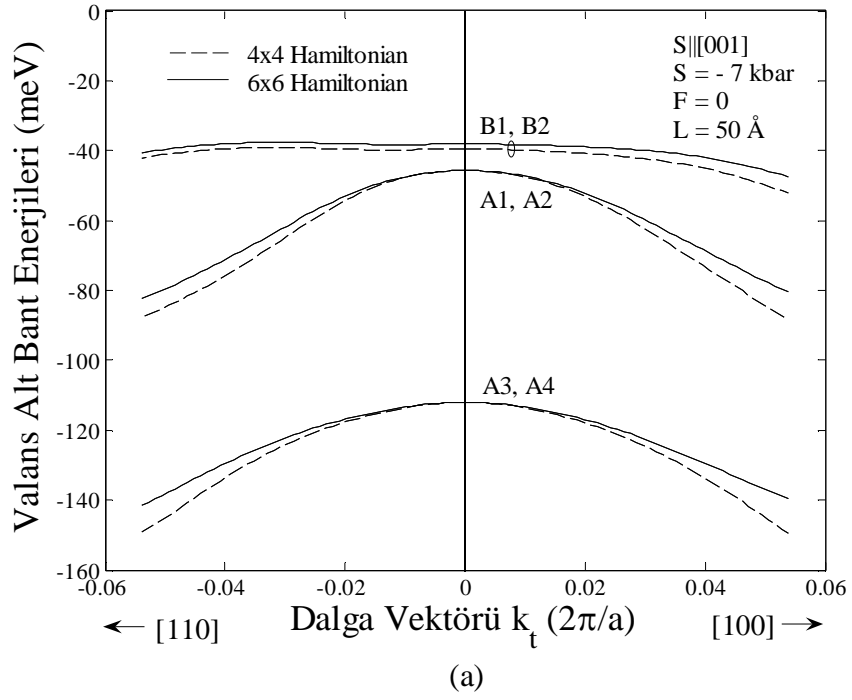


(a)



(b)

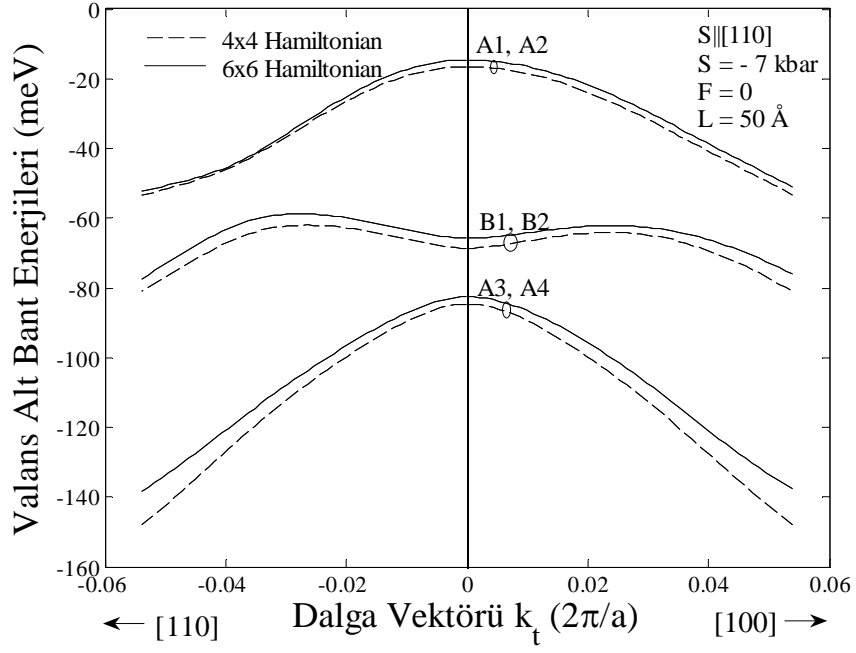
Şekil 8.6. $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_x = 0$ 'da A1, A2 alt bantlarına ait normalize dalga fonksiyonlarının mutlak karesinin çizimi: (a) $S = -7$ kbar ve (b) $S = 7$ kbar. Burada $|\Psi|^2 = |\Psi_{HH}|^2 + |\Psi_{LH}|^2 + |\Psi_{SO}|^2 = 1$ dir.



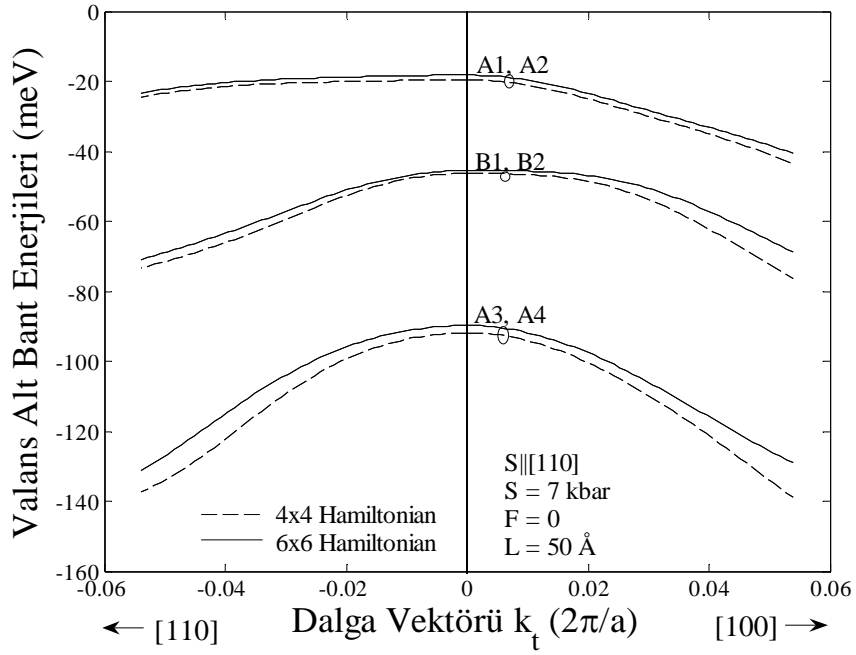
Şekil 8.7. $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$.

Şekil 8.7.'de $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -7$ kbar ve (b) $S = 7$ kbar için verilmiştir. Şekil 8.7.(a)'ya bakıldığında B1, B2 alt bantlarının A sınıfı alt bantlarının üstünde olduğu görülmektedir. $S||[001]$ doğrultusunda $S = -7$ kbar'lık baskı uygulanması ile B sınıfı alt bantları enerji ekseninde yukarıya doğru çıkarken A sınıfı alt bantlar aşağıya doğru düşmektedir. $S||[001]$ doğrultusunda $S = 7$ kbar'lık baskı uygulandığı durumda ise, A sınıfı alt bantlar yukarı doğru çıkarken, B sınıfı alt bantlar aşağıya doğru düşmektedir. $S||[001]$ doğrultusunda $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusuna baskı uygulandığı zaman $k_t = 0$ 'da alt bantların karakterleri HH, LH ve SO karakterlerinin bir karışımı değildir. A sınıfı alt bantlar %100 HH, B sınıfı alt bantlar da %100 LH karakteri taşımaktadır. $k_t \neq 0$ 'da ise yine HH, LH ve SO karakterlerinin bir karışımıdır. Ayrıca Şekil 8.7.'den $k_t = 0$ 'da LH karakteri taşıyan bantların (B1, B2 alt bantları) SO bandının (6×6 Hamiltonian) hesaba katılmasından etkilendiği görülmektedir. Bunun nedeni, 6×6 'lık Luttinger-Kohn Hamiltonian'ında $k_t = 0$ 'da LH ve SO bantları birbiri ile çiftlenimli olmasıdır.

Şekil 8.8.'de $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -7$ kbar ve (b) $S = 7$ kbar için verilmiştir. Bu şekle baktığımızda, baskının $S||[110]$ doğrultusunda uygulanmasından dolayı alt bantların k_t 'ye göre değişiminin daha önceki baskı türlerinin değişiminden daha farklı olduğu görülebilir. Baskının pozitif ya da negatif olmasına göre $k_t = 0$ 'da A1, A2 alt bantları ile B1, B2 alt bantları arasındaki enerji farkı ya azalmakta ya da artmaktadır. Ayrıca $k_t = 0$ 'da alt bantların karakteri yine HH, LO ve SO bantlarının birer karışımıdır. Örneğin, 4×4 'lük Luttinger-Kohn Hamiltonian'ının kullanılması durumunda $S = -7$ kbar'lık baskı altında $k_t = 0$ 'da $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun A1, A2 alt bant enerjilerine ait dalga fonksiyonları %91.9 ($HH \uparrow + HH \downarrow$) ve %8.1 ($LH \uparrow + LH \downarrow$) karakterini, B1, B2 alt bant enerjilerine ait dalga fonksiyonları %91.7 ($LH \uparrow + LH \downarrow$) ve %8.3 ($HH \uparrow + HH \downarrow$) karakterini taşımaktadır. $S = 7$ kbar'lık baskı altında ise, $k_t = 0$ 'da $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun A1, A2 alt bant enerjilerine ait dalga fonksiyonları %55.2 ($HH \uparrow + HH \downarrow$) ve %44.8 ($LH \uparrow + LH \downarrow$) karakterini, B1, B2 alt bant enerjilerine ait dalga fonksiyonları %55.2 ($LH \uparrow + LH \downarrow$) ve %44.8 ($HH \uparrow + HH \downarrow$) karakterini taşımaktadır.



(a)

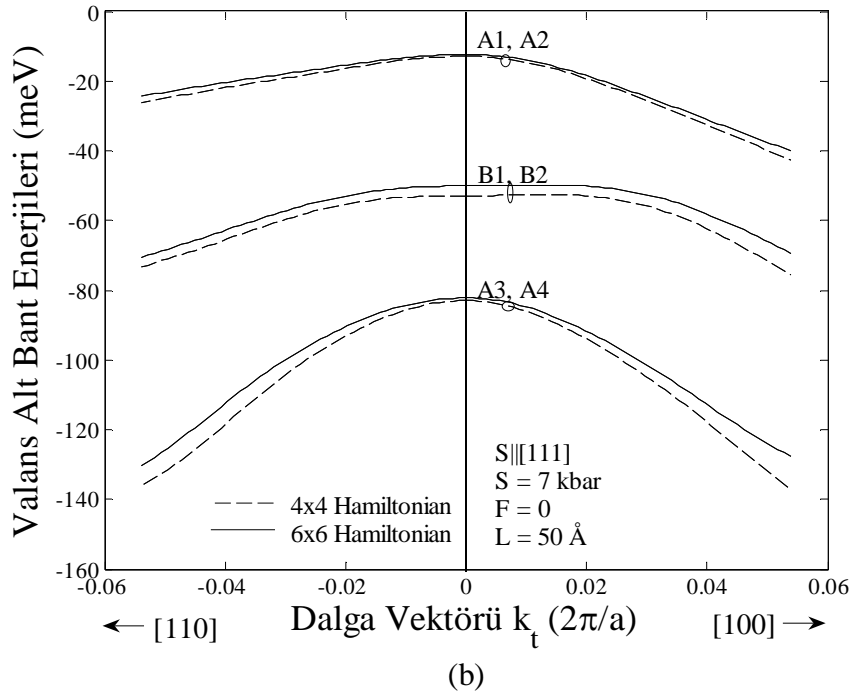
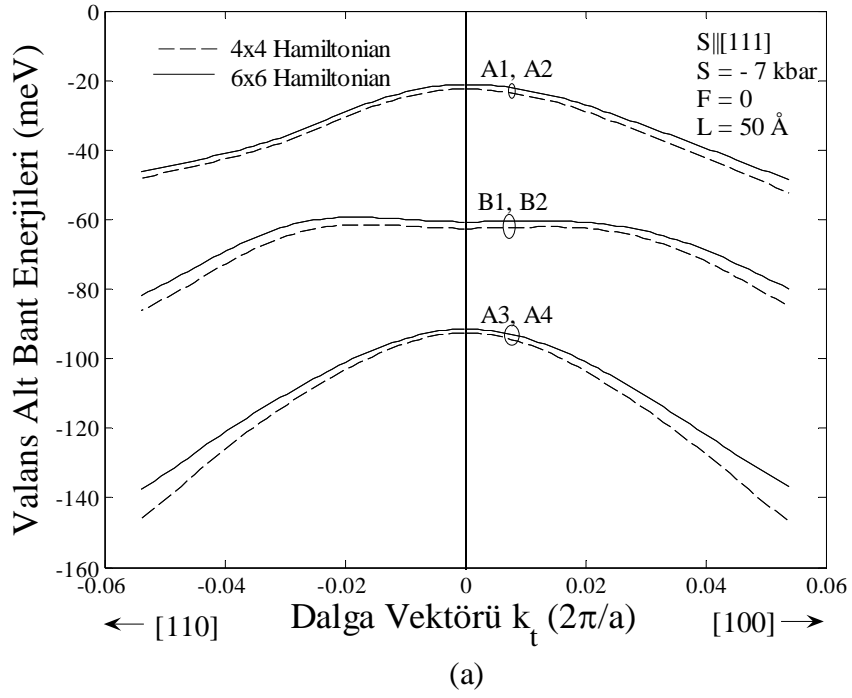


(b)

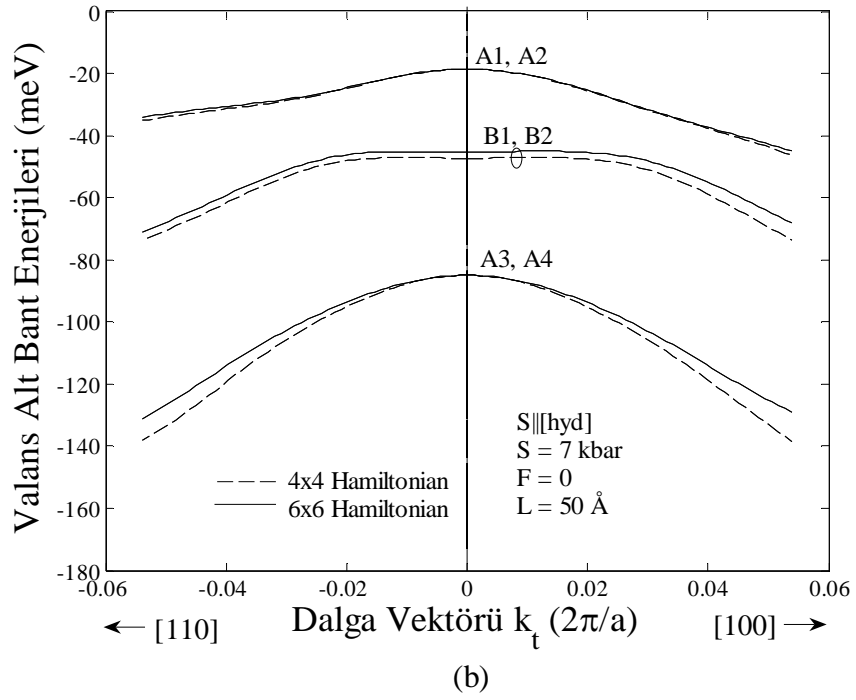
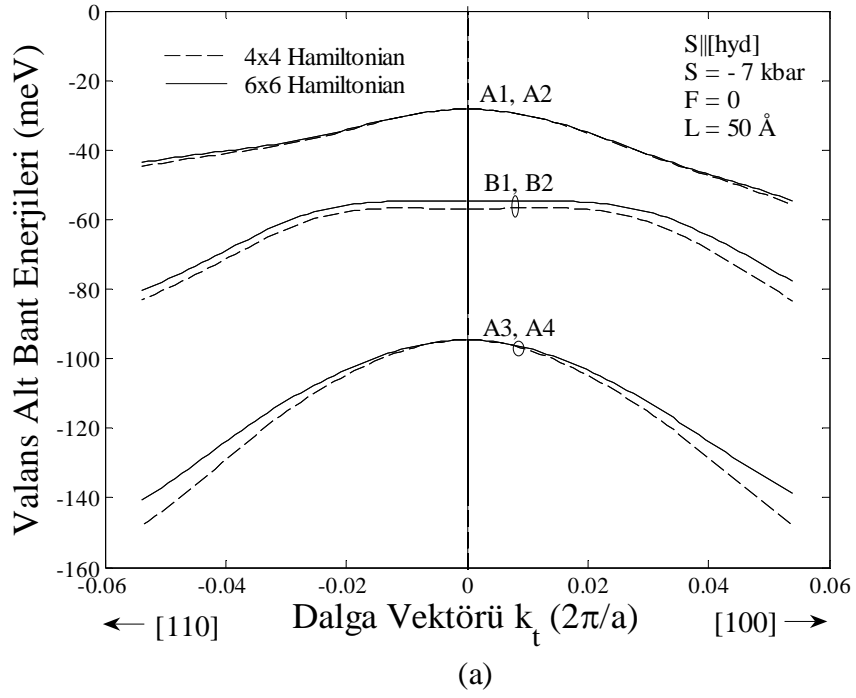
Şekil 8.8. $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ Å}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$.

Şekil 8.9.'da $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -7$ kbar ve (b) $S = 7$ kbar için verilmiştir. Buradaki alt bantların davranışı baskının $S||[111]$ doğrultusunda uygulanmasından dolayı daha önceki baskı türlerindeki alt bantların davranışından farklıdır. Ayrıca $k_t = 0$ 'da alt bantlar, diğer baskı türlerinin alt bantlarına ait ağırlıklı oranlardan farklı oranlar taşımaktadır. Yani, $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında alt bantlar, diğer baskı türlerindeki alt bantlardan farklı oranlarda HH, LH ve SO karakterlerinden oluşmaktadır.

Şekil 8.10.'da hidrostatik baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -7$ kbar ve (b) $S = 7$ kbar için verilmiştir. Bu baskı türü altındaki kuantum kuyusunda alt bantların k_t 'ye göre değişimi $S = 0$ durumundaki $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk kuyunun davranışı ile aynıdır. Buradaki tek fark, alt bant enerjilerinin enerji ekseninde aşağıya veya yukarıya kaymasıdır. Örneğin, $S = -7$ kbar için alt bantlar $S = 0$ durumundakine göre aşağıya doğru kaymıştır, $S = 7$ kbar için ise alt bantlar $S = 0$ durumundakine göre yukarıya doğru kaymıştır. Burada $S = 0$ durumundaki gibi $k_t = 0$ 'da alt bantlar sadece bir karakterden gelen katkı ile ifade edilmektedir. Yani, $k_t = 0$ 'da alt bantlar sadece HH (veya LH veya SO) karakteri taşımaktadır.



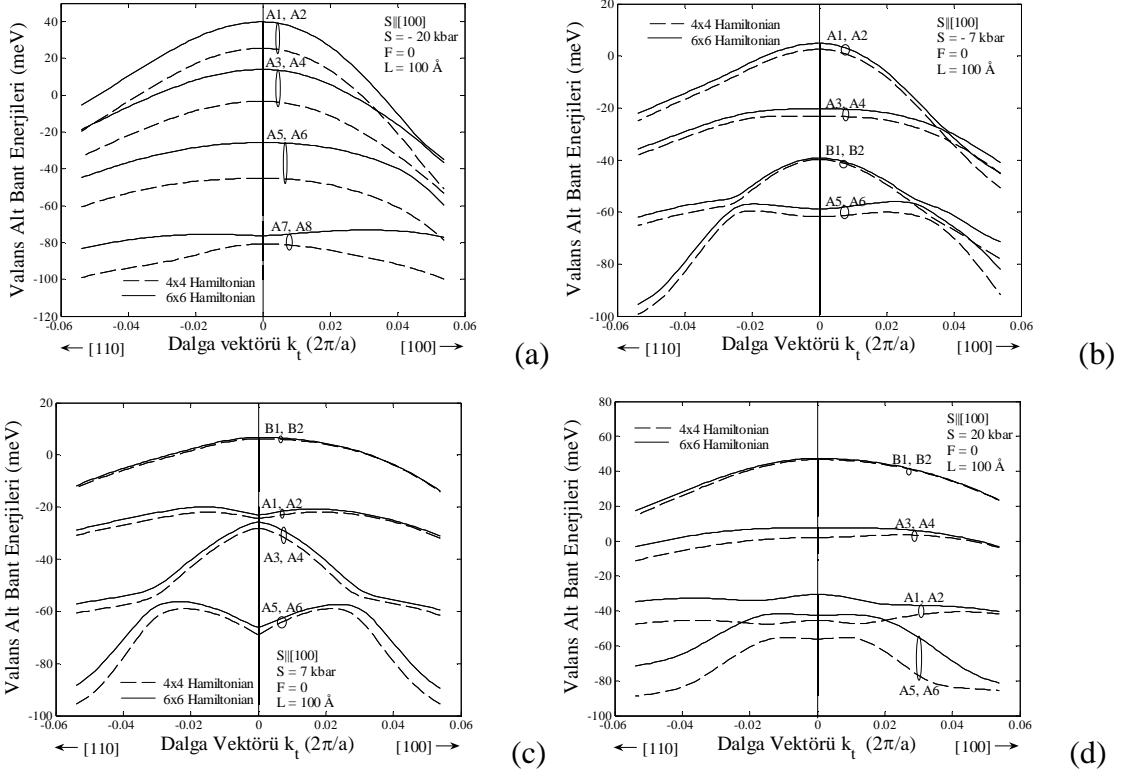
Şekil 8.9. $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 50 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$.



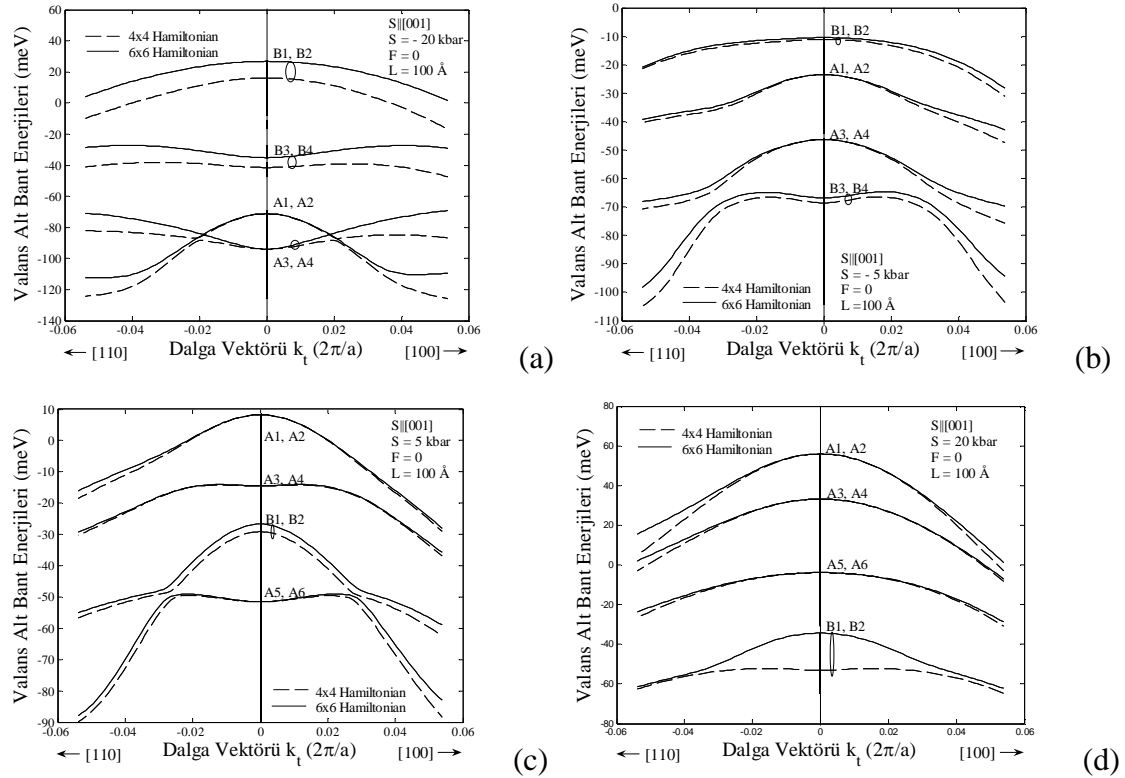
Şekil 8.10. Hidrostatik baskı altında $L = 50 \text{ Å}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -7 \text{ kbar}$ ve (b) $S = 7 \text{ kbar}$.

Şekil 8.11.'de $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar için gösterilmiştir. Baskının negatif olduğu şekillere (Şekil 8.11.(a) ve (b)) bakıldığında, B sınıfı alt bantlar aşağıya doğru kayarlarken A sınıfı alt bantlar yukarı doğru kayarlar. $S = -20$ kbar değerinde ise artık ilk 8 alt bant sadece A sınıfı alt bantlardan oluşmaktadır. Ayrıca negatif baskının artması ile, 4×4 'lük Hamiltonian ve 6×6 'lık Hamiltonian durumları arasındaki farkın arttığı ve alt bantların k_t 'ye bağlı davranışının değiştiği görülebilir. Baskının pozitif olduğu şekillere (Şekil 8.11.(c) ve (d)) bakıldığında, A1, A2 alt bantlarının aşağıya doğru kayarken, B1, B2 ve A3, A4, A5, A6 alt bantlarının yukarıya doğru kaydığı görülmektedir. Burada da yine pozitif baskının artması ile alt bantların k_t 'ye bağlı davranışının değiştiği ve 4×4 'lük Hamiltonian ile 6×6 'lık Hamiltonian durumları arasındaki farkın arttığı görülmektedir.

Şekil 8.12.'de $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -5$ kbar, (c) $S = 5$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar için gösterilmiştir. Şekil 8.12. (a) ve (b)'den de görüldüğü gibi negatif baskının artması ile valans bandında en düşük enerjili alt bantlar B sınıfı alt bantlardan oluşmaktadır. Bu durumun tersi ise baskının pozitif olması durumunda ortaya çıkar. Yani, pozitif baskının artması ile valans bandında en düşük enerjili alt bantlar A sınıfı alt bantlardan oluşmaktadır (Şekil 8.12. (c) ve (d)). $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda $k_t = 0$ 'da 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı ve 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonianı (spin yörünge bandı içeren) ile hesaplanan A sınıfı alt bantlar arasında fark yoktur. B sınıfı alt bantların enerjileri ise bu durumdan etkilenmektedir. Özellikle baskının büyüklüğü arttığında B sınıfı alt bantların 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı ve 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonianı ile hesaplanan değerleri arasındaki fark artmaktadır.



Şekil 8.11. $S \parallel [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi: (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar.

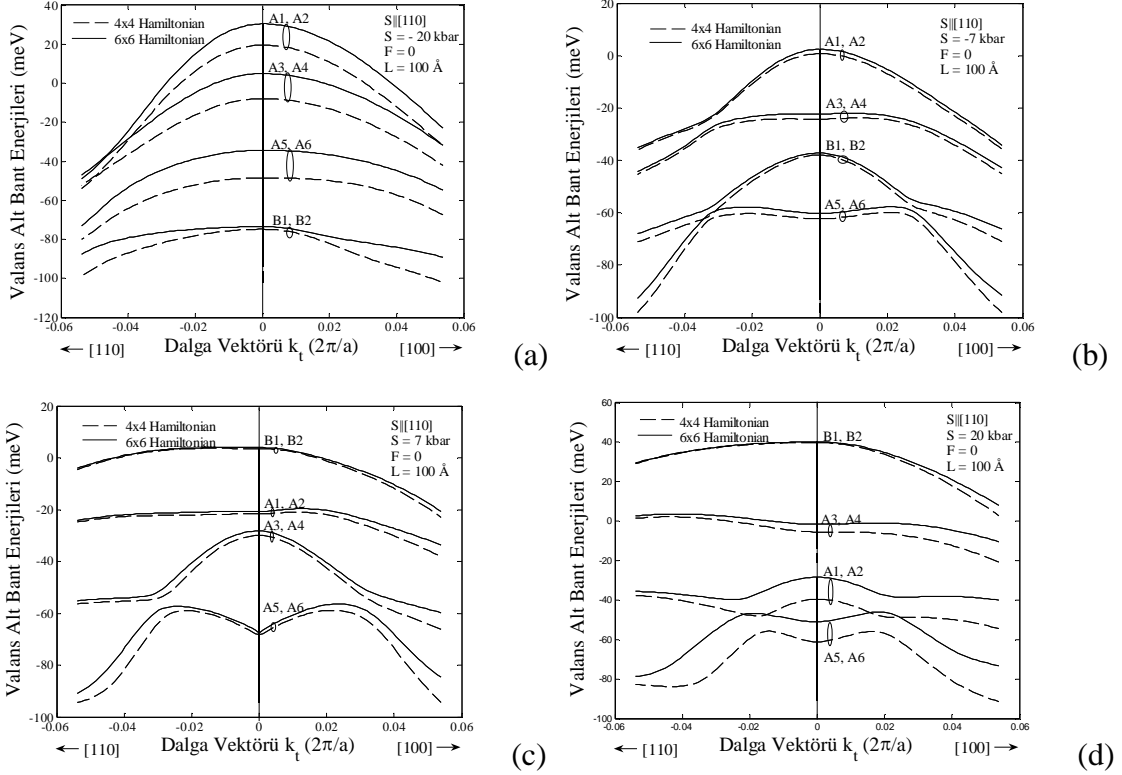


Şekil 8.12. $S \parallel [001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -5$ kbar, (c) $S = 5$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar.

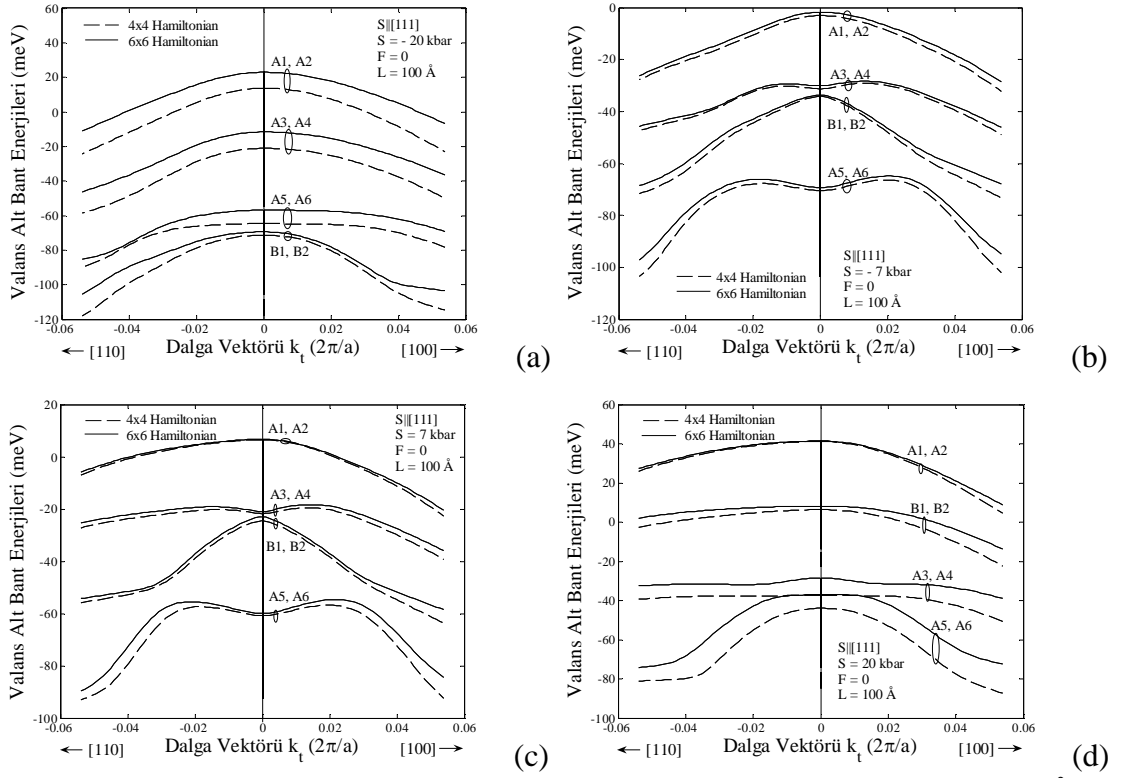
Şekil 8.13.'te $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar için verilmiştir. Negatif baskı altında A sınıfı alt bantlar yukarı doğru kayarken B sınıfı alt bantlar aşağıya doğru kaymaktadır. Pozitif baskı altında ise A1, A2 alt banları aşağıya kayarken B1, B2, A3, A4, A5, A6 alt banları yukarıya doğru kaymaktadır. Şekillerden de görüldüğü gibi baskı arttıkça spin yörünge bandının etkisi de artmaktadır (6×6 Hamiltonian).

Şekil 8.14.'te $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar için verilmiştir. Negatif baskının artması ile birlikte B sınıfı alt bantlar aşağıya doğru kaymakta iken A sınıfı alt bantlar yukarıya doğru kaymaktadır. Pozitif baskı altında A1, A2, B1, B2, A5, A6 alt banları yukarı doğru kaymakta iken A3, A4 alt banları önce yukarı sonra aşağıya doğru kaymaktadır. Alt bantların k_t 'ye göre değişimleri diğer baskı türlerinden daha farklıdır.

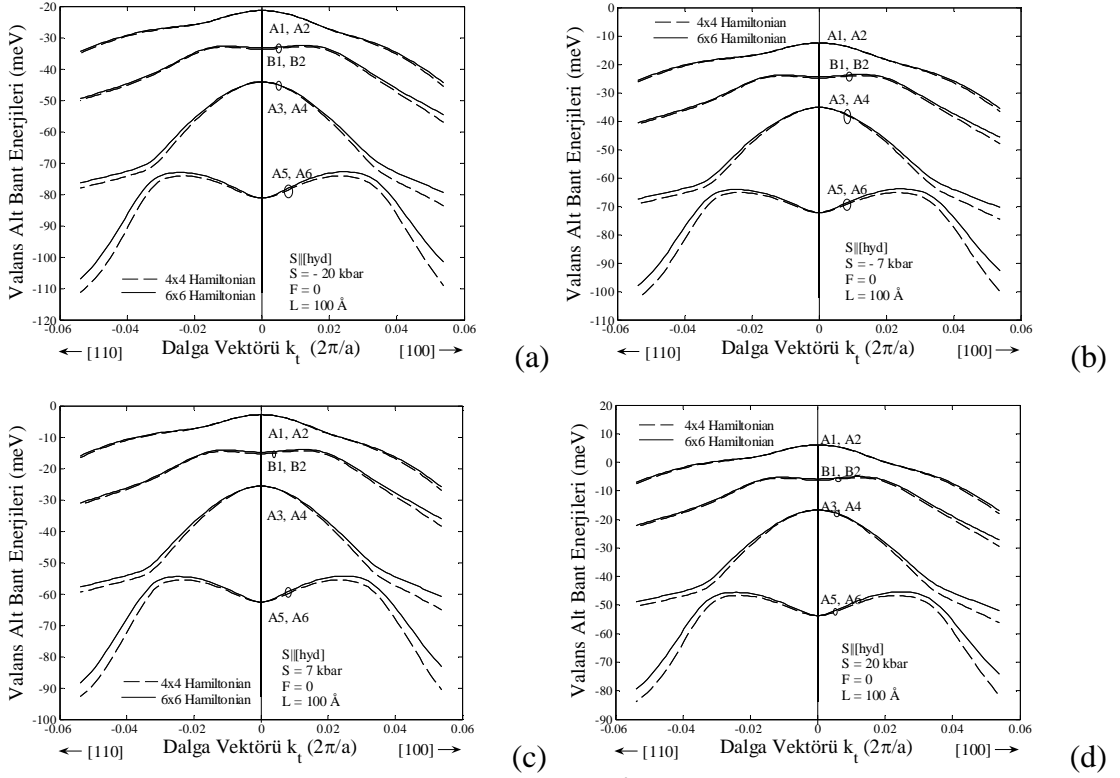
Şekil 8.15.'te hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar için verilmiştir. Şekle dikkatli bakıldığında alt bantların pozitif baskı altında yukarıya doğru kaydığı, negatif baskı altında ise aşağıya doğru kaydığı görülmektedir. Bu kayma sırasında alt bantların k_t 'ye göre davranışı değişmemektedir. Yani, $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyunun $S = 0$ durumundaki (Şekil 8.1. (b)) alt bantların k_t 'ye göre davranışının aynısını göstermektedir.



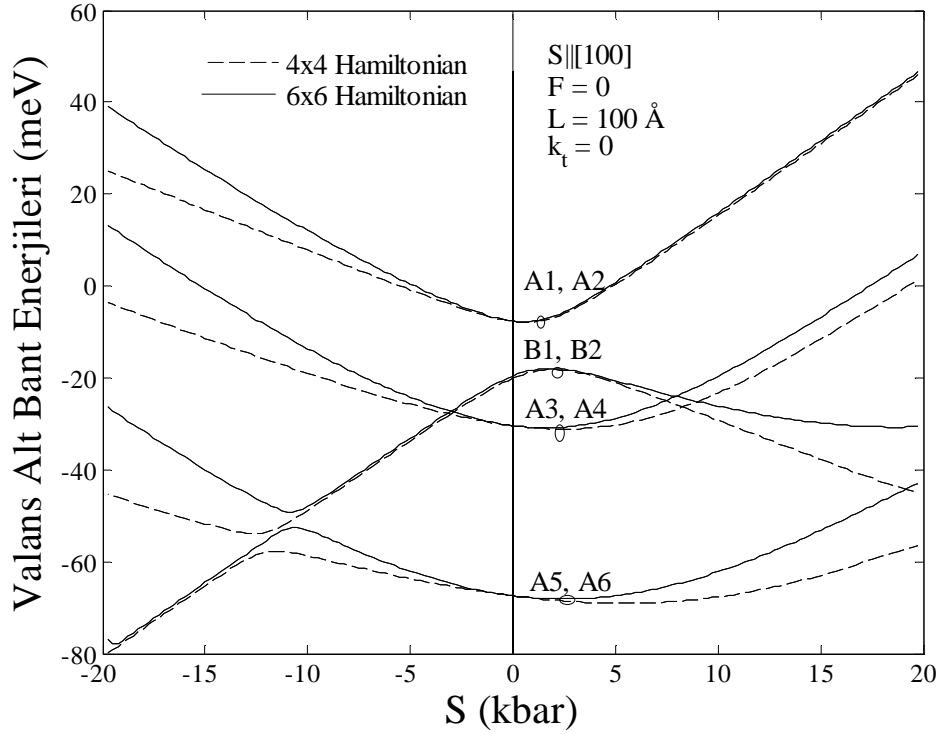
Şekil 8.13. $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar.



Şekil 8.14. $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar.



Şekil 8.15. Hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun valans alt bant enerjilerinin dalga vektörüne göre değişimi (a) $S = -20$ kbar, (b) $S = -7$ kbar, (c) $S = 7$ kbar ve (d) $S = 20$ kbar.

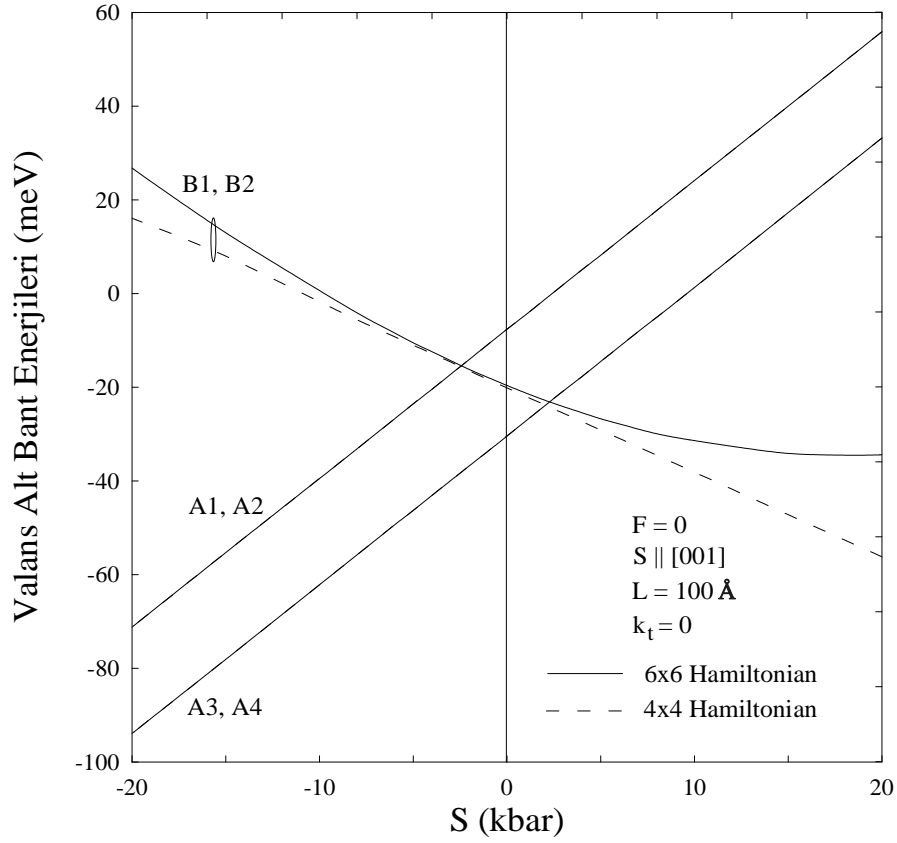


Şekil 8.16. $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi.

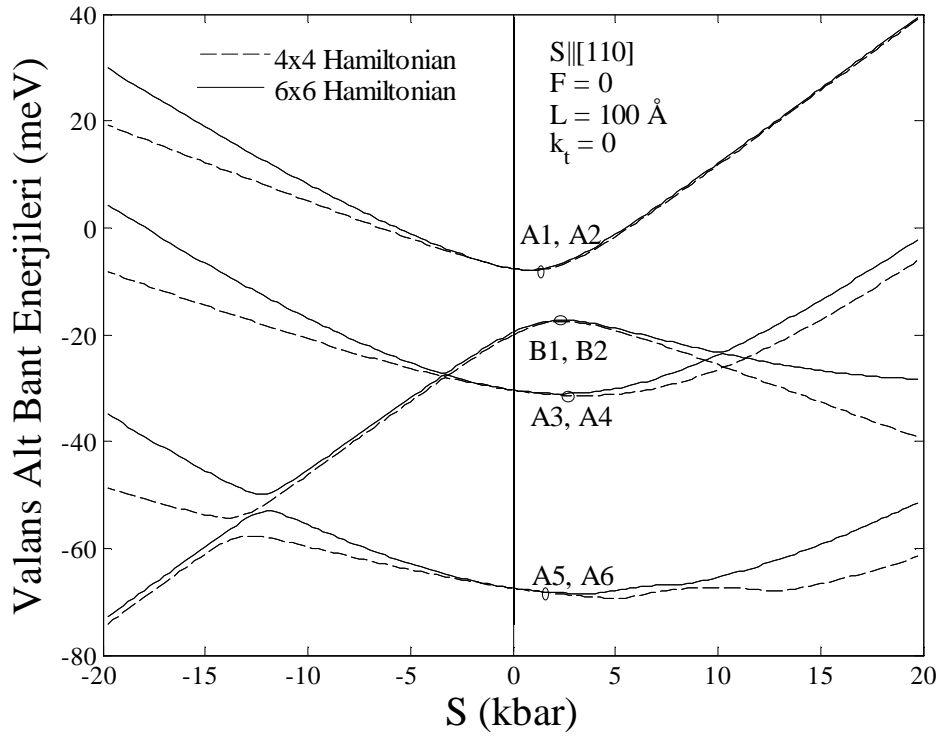
Şekil 8.16.'da $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi verilmiştir. A sınıfı alt bantların enerjileri baskının artması ile artmakta iken B sınıfı alt bantların enerjileri baskının artması ile azalmaktadır. Ayrıca baskının artması ile 4×4 ve 6×6 'lık Hamiltonianlar ile hesaplanan A sınıfı alt bantlar arasındaki fark artmaktadır. B sınıfı alt bantlarda ise, negatif baskının artması ile 4×4 ve 6×6 'lık Hamiltonianlar arasında fark çok az iken pozitif baskının artması ile bu fark artmaktadır.

Şekil 8.17.'de $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, A sınıfı alt bantlar baskı ile lineer olarak değişmekte iken, B sınıfı bantların değişimi daha yumuşaktır. A sınıfı alt bantların enerjileri negatif baskının artması ile lineer olarak azalırken, B sınıfı alt bantların enerjileri artmaktadır. Pozitif baskının artması ile ise, A sınıfı alt bantların enerjileri lineer olarak artmakta ve B sınıfı alt bantların enerjileri azalmaktadır. Burada göze çarpan diğer bir nokta ise; 4×4 ve 6×6 'lık Hamiltonianlar ile hesaplanan alt bant enerjilerinden sadece B sınıfı alt bantların enerjilerinde fark olmasıdır. A sınıfı alt bantların enerjileri Hamiltonianın boyutundan etkilenmemiştir.

Şekil 8.18.'de $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi gösterilmiştir. Bu şekildeki alt bantların genel davranışı Şekil 8.16.'daki gibidir. Fakat burada alt bant enerjilerinin baskı ile değişim miktarları farklıdır. Örneğin, 6×6 'lık Hamiltonian ile hesaplanan durumları göz önüne alarak; $S||[100]$ durumunda A1, A2 alt bantlarının enerjisi baskının 0'dan -20 kbar 'a değişmesi ile $\sim 40 \text{ meV}$ 'lik değişime uğrarken, $S||[110]$ durumunda A1, A2 alt bantlarının enerjisi $\sim 30 \text{ meV}$ 'lik bir değişime uğramaktadır.

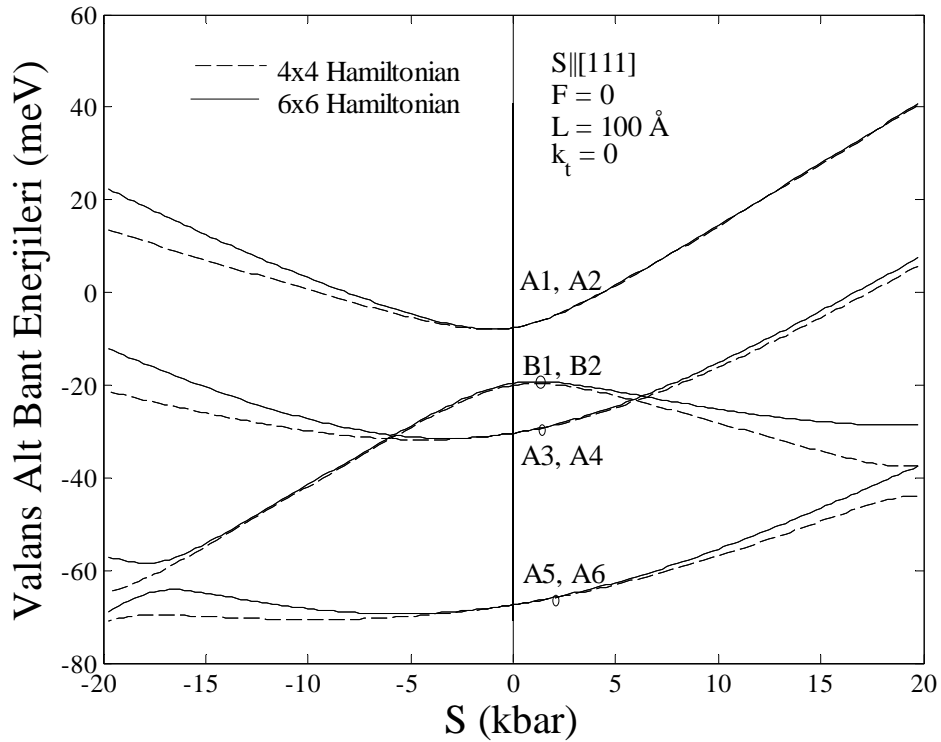


Şekil 8.17. $S \parallel [001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi.



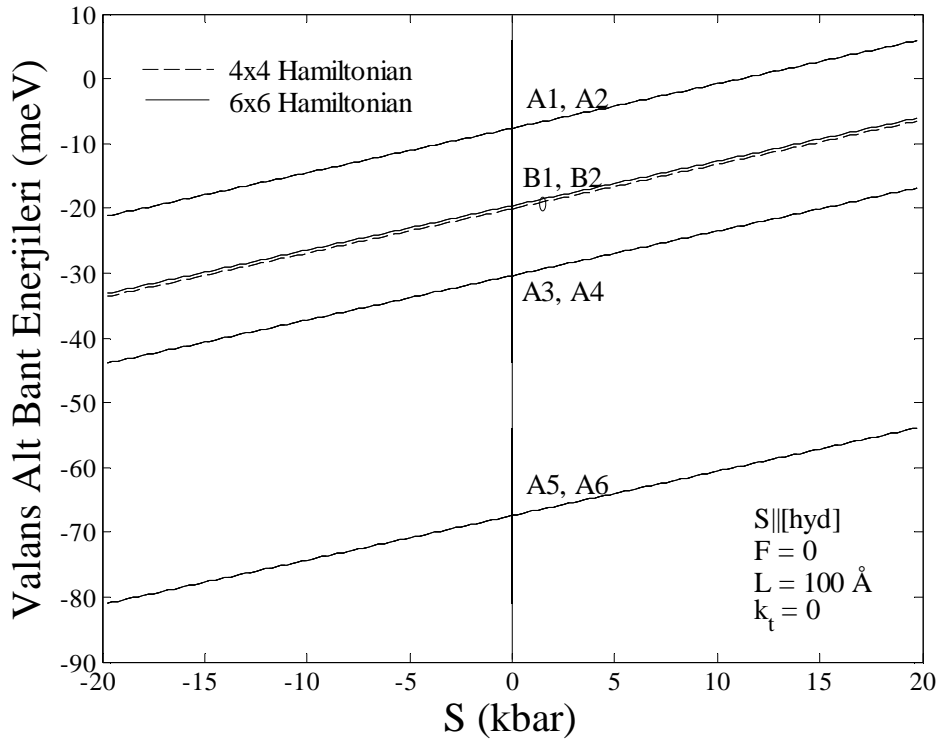
Şekil 8.18. $S \parallel [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 8.19.'da $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi gösterilmiştir. Burada A sınıfı alt bantların enerjileri baskının büyüklüğünün artması ile artmakta, B sınıfı alt bantların enerjisi ise azalmaktadır. Pozitif baskının artması ile alt bant enerjilerinin değişimi daha büyük iken, negatif baskının artması ile alt bant enerjileri daha küçük bir değişime uğramaktadır. Örneğin, A1, A2 alt bant enerjisi baskının 0'dan 20 kbar'a değişmesi ile $\sim 40 \text{ meV}$ değişmekte, A1, A2 alt bant enerjisi baskının 0'dan -20 kbar 'a değişmesi durumunda ise $\sim 20 \text{ meV}$ değişmektedir. Ayrıca A sınıfı bantlar, pozitif yönde baskı uygulanması durumunda negatif yöndekine göre spin yörünge bandının (6×6 'lık Hamiltonian) hesaba katılmasından daha az etkilendiği görülmektedir. B sınıfı alt bantlarında ise bu durumun tersi görülmektedir.



Şekil 8.19. $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 8.20.'de hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, bütün alt bantlar baskıya lineer olarak bağlıdır. Alt bant enerjileri baskının pozitif yönde artması ile lineer olarak artarken, negatif yönde baskının artması ile de lineer olarak azalmaktadır. Bu lineer değişim alt bantların enerji ekseninde yukarı veya aşağıya doğru kayması şeklinde daha önce görülmüştü. Burada spin yörünge bandının hesaba katılmasından sadece B sınıfı alt bantların etkilendiği görülmektedir. Bunun nedeni daha önce açıklandığı gibi alt bantların karakterleri ile ilgilidir. LH karakteri taşıyan bantlar SO bandının hesaba katılmasından etkilenirken, sadece HH karakteri taşıyan bantlar etkilenmemektedir.



Şekil 8.20. Hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun $k_t = 0$ 'da valans alt bant enerjilerinin baskının büyüklüğüne göre değişimi.

9. ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNDAKİ EKZİTONLAR

III-V bileşiklerinin külçe valans bantlarındaki çiftlenimden dolayı ekziton zarf fonksiyonu N_c tane parçadan oluşur. Burada N_c , çiftlenimli valans bandı sayısını ifade eder. Bundan dolayı kuantum kuyusu sistemi için ekziton zarf fonksiyonu

$$\bar{g}(\bar{\rho}, z_e, z_h) = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{N_c} \end{bmatrix} \quad (9.1)$$

biçimine sahiptir. Burada $\bar{\rho} = \bar{\rho}_e - \bar{\rho}_h$ kuantum kuyusunun düzlemindeki bağlı koordinattır ve $z = z_e - z_h$ kısmı yoktur (Bu doğrultudaki periyodiklik bozulduğu için).

Baskı ve büyültme doğrultusunda (yani, burada z doğrultusu) uygulanan elektrik alanı altında ekziton öz durumları aşağıdaki Hamiltonian'la bulunur.

$$\begin{array}{c} \overline{\overline{H}}_e \text{ elektron kısmı} \qquad \qquad \qquad \overline{\overline{H}}_h \text{ hole kısmı} \\ \left[E_C (-i\bar{\nabla}_e) \bar{I} + U_e(z_e) \bar{I} + eFz_e \bar{I} \right] \bar{g}(\bar{\rho}, z_e, z_h) \left(\left[\overline{\overline{H}}_h (-i\bar{\nabla}_h) + U_h(z_h) \bar{I} + eFz_h \bar{I} \right] \bar{g}(\bar{\rho}, z_e, z_h) \right. \\ \left. + U_{Coul}(|z_e - z_h|, \rho) \bar{I} \bar{g}(\bar{\rho}, z_e, z_h) = (E_X - E_g) \bar{g}(\bar{\rho}, z_e, z_h) \right) \end{array} \quad (9.2)$$

Hole enerji eksenini çevirdik.

Burada $e > 0$ alındı ve yukarıdaki eşitlik elektronla hole arasındaki “Exchange” terimini içermemektedir. Ayrıca $U_e(z_e)$, elektronlar için kuşatma potansiyeli, $U_h(z_h)$ da holler için kuşatma potansiyelidir.

Buradan

$$\overline{\overline{H}} \cdot \bar{g} = E_g \bar{g} \quad \text{veya} \quad \left[\overline{\overline{H}}_e + \overline{\overline{H}}_h + \overline{\overline{H}}_{eks} \right] \cdot \bar{g} = (E_X - E_g) \bar{g} \quad (9.3)$$

elde edilir. Ekziton enerjisini bulmak için aşağıdaki eşitliği çözmeliyiz.

$$\int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \cdot \bar{g}^\dagger(\bar{\rho}, z_e, z_h) \cdot \overline{\overline{H}} \cdot \bar{g}(\bar{\rho}, z_e, z_h) = \iiint dz_e dz_h d^2 \rho \bar{g}^\dagger \cdot (E_X - E_g) \cdot \bar{g} \quad (9.4)$$

Bununla birlikte bu eşitliğe FEM'i uygulamak için dönüşüm yapmamız gerekir. Birinci dönüşüm; Hamiltonianın diferansiyel operatörleri içeren terimlerini dönüştürmedir.

Yani, E_C , $\overline{\overline{E_V}}$ terimleri k 'ya bağlı (k_x, k_y) iken, \overline{g} zarf fonksiyonu gerçek uzaya bağlıdır. Biz bu zarf fonksiyonunu k uzayında yazmalıyız. k_z terimleri operatöre dönüştü ve sadece z_e (z_h) terimlerine etkir. Operatör içeren terimleri (E_C , $\overline{\overline{E_V}}$) işlem yapacak duruma dönüştürmek için $\overline{g}(\overline{\rho}, z_e, z_h)$ 'yı iki boyutlu Fourier transformu ile seriye açmalıyız. $\overline{k}_t = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ ($k_x = k_t \cos \phi$, $k_y = k_t \sin \phi$) olmak üzere,

$$\overline{g}(\overline{\rho}, z_e, z_h) = \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} e^{i\overline{k}_t \cdot \overline{\rho}} \overline{g}(\overline{k}_t, z_e, z_h) \quad (9.5)$$

dir. Benzer olarak

$$\overline{g}^\dagger(\overline{\rho}, z_e, z_h) = \int \frac{d^2 k_t'}{(2\pi)^2} e^{-i\overline{k}_t' \cdot \overline{\rho}} \overline{g}^\dagger(\overline{k}_t', z_e, z_h) \quad (9.6)$$

yazılır. O zaman

$$-i\overline{\nabla}_{te} \rightarrow \overline{k} \quad \text{ve} \quad -i\overline{\nabla}_{th} \rightarrow -\overline{k} \rightarrow \overline{k}$$

olur. Yani, Luttinger-Kohn Hamiltonianı $-\overline{k}_{th} \rightarrow \overline{k}_{th}$ dönüşümü altında değişmez kalır ve

$$\overline{\overline{E_V}}(\overline{k}_t, k_z) \equiv \overline{\overline{E_V}}(-\overline{k}_t, k_z) \quad (9.7)$$

şeklinde yazılabilir. (9.4) denklemini, (9.5) ve (9.6) denklemleri kullanılarak,

$$\begin{aligned} & \left\{ \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \int \frac{d^2 k_t'}{(2\pi)^2} e^{-i\overline{k}_t' \cdot \overline{\rho}} \overline{g}^\dagger(\overline{k}_t', z_e, z_h) \left[E_C(\overline{k}_t, -i\frac{\partial}{\partial z_e}) \overline{I} - \overline{\overline{E_V}}(\overline{k}_t, -i\frac{\partial}{\partial z_h}) \right] \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} e^{i\overline{k}_t \cdot \overline{\rho}} \overline{g}(\overline{k}_t, z_e, z_h) \right\} \\ & + \left\{ \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \overline{g}^\dagger(\overline{\rho}, z_e, z_h) \left[+eFz_e - eFz_h + U_e(z_e) - U_h(z_h) + U_{coul}(|\overline{z}_e - \overline{z}_h|, \rho) \right] \overline{I} \overline{g}(\overline{\rho}, z_e, z_h) \right\} \\ & = \iiint dz_e dz_h d^2 \rho \overline{g}^\dagger(\overline{\rho}, z_e, z_h) \cdot (E_x - E_g) \cdot \overline{g}(\overline{\rho}, z_e, z_h) \end{aligned} \quad (9.8)$$

şekline dönüşür. Birinci terimdeki integrasyon sırasını değiştirirsek,

$$\int dz_e \int dz_h \int \frac{d^2 k_t'}{(2\pi)^2} \overline{g}^\dagger(\overline{k}_t', z_e, z_h) \left[E_C \overline{I} - \overline{\overline{E_V}} \right] \int d^2 k_t \overline{g}(\overline{k}_t, z_e, z_h) \underbrace{\int \frac{d^2 \rho}{(2\pi)^2} e^{i(\overline{k}_t - \overline{k}_t') \cdot \overline{\rho}}}_{\delta^{(2)}(\overline{k}_t' - \overline{k}_t)} \quad (9.9)$$

$$\overline{g}(\overline{k}_t', z_e, z_h)$$

elde edilir. Buradan birinci terimin valans ve iletkenlik bandı için dispersiyon matrislerini içerdiğini söyleyebiliriz. Dolayısıyla (9.8) denklemini,

$$\begin{aligned}
& \int dz_e \int dz_h \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \bar{g}^\dagger(\vec{k}_t, z_e, z_h) \left[E_C(\vec{k}_t, -i \frac{\partial}{\partial z_e}) \bar{I} - \bar{E}_V(\vec{k}_t, -i \frac{\partial}{\partial z_h}) \right] \bar{g}(\vec{k}_t, z_e, z_h) \\
& + \left\{ \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \bar{g}^\dagger(\vec{\rho}, z_e, z_h) [+eFz_e - eFz_h + U_e(z_e) - U_h(z_h)] \bar{I} \bar{g}(\vec{\rho}, z_e, z_h) \right\} \\
& + \left\{ \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \bar{g}^\dagger(\vec{\rho}, z_e, z_h) [U_{coul}(|\vec{z}_e - \vec{z}_h|, \rho) \bar{I}] \bar{g}(\vec{\rho}, z_e, z_h) \right\} \\
& = \iiint dz_e dz_h d^2 \rho \cdot \bar{g}^\dagger(\vec{\rho}, z_e, z_h) \cdot (E_x - E_g) \cdot \bar{g}(\vec{\rho}, z_e, z_h)
\end{aligned} \tag{9.10}$$

şekline dönüşür. Biz enine ve boyuna doğrultular için çiftlenim olmadığı yaklaşımını yapabiliriz. Dolayısıyla,

$$\bar{g}(\vec{\rho}, z_e, z_h) \equiv \bar{\phi}(\vec{\rho}) \bar{S}(z_e, z_h) \tag{9.11}$$

ve benzer olarak da

$$\bar{g}(\vec{k}_t, z_e, z_h) \equiv \bar{\phi}(\vec{k}_t) \bar{S}(z_e, z_h) \tag{9.12}$$

yazılabilir.

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

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

Bu tanımlamaları yaptıktan sonra sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile kısmi diferansiyel denklemlerini içeren (9.10) denkleminin enerji özdeğer ve özfonksiyonlarını bulabiliriz. Bunun için ilk önce çalışma uzayımız düzgün lineer üçgenlere bölünür (bölünmüş olan her bir üçgene global element denir). Daha sonra her elemente Galerkin zayıf formülasyon yöntemi uygulanır. Bu yöntemle denklem (9.2)'deki kısmi diferansiyel denklemlerin derecesi ikiden bire düşürülür (kısmi integrasyon uygulanarak). Zarf

fonksiyonunun (z_e, z_h) 'e bağlı kısmı $\bar{S}(z_e, z_h)$ aşağıdaki gibi yazılabilir. Yani, $\bar{S}(z_e, z_h)$ interpolasyon yapılarak;

Çiftlenimli bantlar yok iken:

$$S(z_e, z_h) = \sum_{i=1}^{N_n} N_i(z_e, z_h) F_i$$

↓
Tüm uzay baz fonksiyonları

$$S(z_e, z_h) = (N_1 \quad N_2 \quad \dots \quad N_{N_n})^T \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{N_n} \end{pmatrix}$$

$$S(z_e, z_h) = \{N(z_e, z_h)\}^T \{F\} \quad (9.13)$$

Çiftlenimli bantlar var iken:

$$\begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_{N_c} \end{pmatrix} = (N_1 \bar{I} \quad N_2 \bar{I} \quad \dots \quad N_{N_n} \bar{I})^T \begin{pmatrix} \bar{F}_1 \\ \bar{F}_2 \\ \vdots \\ \bar{F}_{N_n} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_{N_c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & \dots & 0 & N_2 & 0 & \dots & 0 & \dots & N_{N_n} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & N_1 & \dots & 0 & 0 & N_2 & \dots & 0 & \dots & 0 & N_{N_n} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & N_1 & 0 & 0 & \dots & N_2 & \dots & 0 & 0 & \dots & N_{N_n} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} F_{1,1} \\ F_{1,2} \\ \vdots \\ F_{1,N_c} \\ F_{2,1} \\ F_{2,2} \\ \vdots \\ F_{2,N_c} \\ \vdots \\ \vdots \\ F_{N_n,1} \\ F_{N_n,2} \\ \vdots \\ F_{N_n,N_c} \end{pmatrix}$$

$$\bar{S}(z_e, z_h) = \{N(z_e, z_h) \bar{I}\}^T \{\bar{F}\} \quad (9.14)$$

yazılabilir. Burada, $N(z_e, z_h)$ 'ler tüm uzayı geren biçim fonksiyonları, F 'ler ise zarf fonksiyonunun her noddaki değerleridir. Burada, Nn tüm uzay içindeki nod sayısını, Nc ise çiftlenimli band sayısını ifade eder ve birim matrisin boyutu $Nc \times Nc$ 'dir.

Bu bilgilerin ışığında denklem (9.10)

$$\begin{aligned}
G = & \int dz_e \int dz_h \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \{ \bar{F} \}^\dagger \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \bar{\phi}^\dagger(\bar{k}_t) \left[E_C(\bar{k}_t, -i \frac{\partial}{\partial z_e}) \bar{I} - \bar{E}_V(\bar{k}_t, -i \frac{\partial}{\partial z_h}) \right] \bar{\phi}(\bar{k}_t) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \{ \bar{F} \} \\
& + \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \{ \bar{F} \}^\dagger \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \bar{\phi}^\dagger(\bar{\rho}) \left(eFz_e - eFz_h + U_e(z_e) - U_h(z_h) - (E_x - E_g) \right) \bar{I} \bar{\phi}(\bar{\rho}) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \{ \bar{F} \} \\
& + \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \{ \bar{F} \}^\dagger \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \bar{\phi}^\dagger(\bar{\rho}) \left[U_{coul}(|\bar{z}_e - \bar{z}_h|, \rho) \bar{I} \right] \bar{\phi}(\bar{\rho}) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \{ \bar{F} \}
\end{aligned} \tag{9.15}$$

şekline dönüşür. Bu denklem üretici denklem olarak adlandırılır. Üretici denkleme, değişim ilkesinin uygulanması ile genelleştirilmiş enerji özdeğer denklemini elde ederiz.

$$G = \{ \bar{F} \}^\dagger \cdot \left\{ \left\{ \bar{\Lambda} \right\} \right\} \cdot \{ \bar{F} \} \tag{9.16}$$

$$\frac{\partial G}{\partial \{ \bar{F} \}^\dagger} = 0 \Rightarrow \left\{ \left\{ \bar{\Lambda} \right\} \right\} \cdot \{ \bar{F} \} = 0 \tag{9.17}$$

Burada,

$$\bar{H} = \bar{H}_C - \bar{H}_V = \left[E_C(\bar{k}_t, -i \frac{\partial}{\partial z_e}) \bar{I} - \bar{E}_V(\bar{k}_t, -i \frac{\partial}{\partial z_h}) \right] \tag{9.18}$$

$$W = \left(eFz_e - eFz_h + U_e(z_e) - U_h(z_h) - (E_x - E_g) \right) \tag{9.19}$$

olmak üzere

$$\begin{aligned}
\left\{ \left\{ \bar{\Lambda} \right\} \right\} = & \int dz_e \int dz_h \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \bar{\phi}^\dagger(\bar{k}_t) \cdot \bar{H} \cdot \bar{\phi}(\bar{k}_t) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& + \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \bar{\phi}^\dagger(\bar{\rho}) \cdot W \cdot \bar{I} \cdot \bar{\phi}(\bar{\rho}) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& + \int dz_e \int dz_h \int d^2 \rho \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \bar{\phi}^\dagger(\bar{\rho}) \left[U_{coul}(|\bar{z}_e - \bar{z}_h|, \rho) \bar{I} \right] \bar{\phi}(\bar{\rho}) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T
\end{aligned} \tag{9.20}$$

dir. Bir sonraki adım \bar{k}_t (veya $\bar{\rho}$) serbestlik derecelerinden kurtulmak olacak. Bunun için $\bar{\phi}(\bar{k}_t)$ (veya $\bar{\phi}(\bar{\rho})$) üzerine yoğunlaşmalıyız.

$$\phi_{\nu\mu}(\bar{k}_t) = \phi_{\nu\mu}(k_t, \varphi) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \phi_{\nu\mu}^{\ell}(k_t) \cdot e^{i\ell\varphi} \quad (\text{Fourier serisi açılımı}) \quad (9.21)$$

Basitleştirmeler; (Daha iyi bir tanımlama yapabilmek için)

- i) s- dalgasının düzlemdeki hareketi; sadece $\ell = 0$ teriminde vardır. $\bar{k}_t \rightarrow (k_t, \varphi)$ ve $\phi_{\nu\mu}^{\ell=0}(k_t)$ dir.
- ii) $\bar{\phi}$ - diagonal; farklı külçe bantlarında düzlemde çiftlenim yok.

Varyasyonel form;

Basitleştirmek için $\bar{\phi}$ 'nin her bileşenini bir varyasyon parametresi ile yazabiliriz.

$$\phi_{\nu\mu}(\bar{k}_t) = \delta_{\nu\mu} \phi_{\mu\mu}^{\ell=0}(k_t, \lambda) \quad (9.22)$$

Burada $\lambda = \{\lambda\}$ 'lar (varyasyon parametreleri), ekziton enerjisini minimize ederek bulunur ve $N_C = 6$ olması durumunda üç varyasyon parametresi kullanılır, $\lambda_A \rightarrow hh$ enerjisini minimize etmek için $(\lambda_B, \lambda_C) \rightarrow (lh, so)$ enerjilerini minimize etmek içindir. $N_C = 4$ olması durumunda ise, iki varyasyon parametresi kullanılır, $\lambda_A \rightarrow hh$ enerjisini minimize etmek için $\lambda_B \rightarrow lh$ enerjisini minimize etmek içindir.

Seçilen Varyasyonel Fonksiyon Bağımlılığı (Hidrojenik);

Ekziton dalga fonksiyonunun düzlemdeki fonksiyonel bağımlılığını hidrojenik seçtik, yani;

$$\phi_{\nu\nu}(\rho) = \frac{1}{\lambda_\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot e^{-\frac{\rho}{\lambda_\nu}} \Rightarrow \phi_{\nu\nu}(k_t) = \frac{\sqrt{8\pi} \cdot \lambda_\nu}{\left[(k_t \lambda_\nu)^2 + 1 \right]^{\frac{3}{2}}} \quad (9.23)$$

Bu basitleştirmelerin ardından $\int d^2 k_t$ ve $\int d^2 \rho$ integrallerini göz önüne alalım.

İlk önce $\int d^2 k_t$ integrali ile başlayalım; Bu integraller aşağıdaki formdadır;

$$\int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \left[\overline{\phi}^\dagger(k_t) \cdot \overline{H_{C(V)}} \cdot \overline{\phi}(k_t) \right]_{ij} = \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \sum_k \phi_{ik}^* \sum_\ell h_{k\ell} \phi_{\ell j} \quad (9.24)$$

k_t 'ye bağlıdır
 \nwarrow \nearrow
 diagonal $\delta_{\ell j} \phi_{jj}$

$$= \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \sum_k \phi_{ik}^* h_{kj} \phi_{jj}$$

$\delta_{ik} \phi_{ii}^*$

$$= \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \phi_{ii}^* h_{C(V),ij} \phi_{jj} \quad (9.25)$$

İntegralleri

$$h_{C(V),ij} \left(\left| \vec{k}_t \right|, k_{z_{e(h)}} \right) = \sum_{n=0}^2 h_{C(V),ij}^{(n)} \cdot k_{z_{e(h)}}^{2-n} \cdot k_t^n + h_{C(V),ij}^{edge} \quad (9.26)$$

için hesaplamalıyız. Buradan,

$$h_{C(V),ij} \left(\left| \vec{k}_t \right|, k_{z_{e(h)}} \right) = h_{C(V),ij}^{(0)} \cdot k_{z_{e(h)}}^2 + h_{C(V),ij}^{(1)} \cdot k_t \cdot k_{z_{e(h)}} + h_{C(V),ij}^{(2)} \cdot k_t^2 + h_{C(V),ij}^{edge}$$

olmak üzere

$$\int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \left[\overline{\phi}^\dagger(k_t) \cdot \overline{H_{C(V)}} \cdot \overline{\phi}(k_t) \right]_{ij} = \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \phi_{ii}^* \cdot \left[\sum_{n=0}^2 h_{C(V),ij}^{(n)} \cdot k_{z_{e(h)}}^{2-n} \cdot k_t^n + h_{C(V),ij}^{edge} \right] \cdot \phi_{jj}$$

$$= \sum_{n=0}^2 h_{C(V),ij}^{(n)} \cdot k_{z_{e(h)}}^{2-n} \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \phi_{ii}^* \cdot k_t^n \cdot \phi_{jj} + h_{C(V),ij}^{edge} \int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \phi_{ii}^* \cdot \phi_{jj} \quad (9.27)$$

şeklinde yazılır. Buradaki integrallerin değerleri aşağıdaki gibidir.

Diagonal ($i = j$ için) terimler için sonuçlar:

$$\int d^2 k_t = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty k_t dk_t \text{ olmak üzere,}$$

$$K_n = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \frac{dk_t}{(2\pi)^2} \frac{8\pi \lambda_i^2 k_t^{n+1}}{\left((k_t \lambda_i)^2 + 1 \right)^3} \quad (9.28)$$

şeklinde verilir. Buna göre,

$$K_0 = 1 \quad ; \quad K_1 = \frac{\pi}{4\lambda_i} \quad ; \quad K_2 = \frac{1}{\lambda_i^2} \quad ; \quad (9.29)$$

ile verilir.

Diagonal olmayan ($i \neq j$ için) terimler için sonuçlar:

$$L_n = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \frac{dk_t}{(2\pi)^2} \frac{8\pi\lambda_i\lambda_j k_t^{n+1}}{\left[(k_t\lambda_i)^2 + 1\right]^{\frac{3}{2}} \left[(k_t\lambda_j)^2 + 1\right]^{\frac{3}{2}}} \quad (9.30)$$

şeklinde verilir. Buna göre,

$$L_0 = \frac{4\lambda_i\lambda_j}{(\lambda_i + \lambda_j)^2} \quad ;$$

$$L_1 = \frac{4\lambda_j \left(-2\lambda_i^2 \text{EllipticE} \left[1 - \frac{\lambda_j^2}{\lambda_i^2} \right] + (\lambda_i^2 + \lambda_j^2) \text{EllipticK} \left[1 - \frac{\lambda_j^2}{\lambda_i^2} \right] \right)}{(\lambda_i^2 - \lambda_j^2)^2} \quad ; \quad (9.31)$$

$$L_2 = \frac{4}{(\lambda_i + \lambda_j)^2} \quad ;$$

ile verilir. Burada *EllipticK*, birinci türden eliptik integral $K(k)$ 'yi ve *EllipticE* de, ikinci türden eliptik integral $E(k)$ 'i simgelemektedir. Ayrıca, diagonal olmayan terimlerde λ_i 'ler değer olarak λ_j 'lere eşit olursa, L_n integralleri $\lambda_i \rightarrow \lambda_j$ limitinde K_n integrallerinin değerlerini aldığı gösterilebilir. Yani, $\lambda_i = \lambda_j$ ise, $L_0 = K_0 = 1$,

$$L_1 = K_1 = \frac{\pi}{4\lambda_i} \text{ ve } L_2 = K_2 = \frac{1}{\lambda_i^2} \text{ olur.}$$

Dolayısıyla (9.27) denklemini ile verilen integral için

$$\int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \left[\overline{\overline{\phi(k_t) \cdot H_{C(V)} \cdot \phi(k_t)}} \right]_{ij} = \sum_{n=0}^2 h_{C(V),ij}^{(n)} \cdot k_{z_{e(h)}}^{2-n} \cdot \left[K_n \delta_{ij} + L_n (1 - \delta_{ij}) \right] + h_{C(V),ij}^{edge} \left[K_0 \delta_{ij} + L_0 (1 - \delta_{ij}) \right] \quad (9.32)$$

elde edilir. Buradan

$$\overline{\overline{h_{C(V)\phi}^{(n)}}} = \overline{\overline{h_{C(V)}^{(n)}}} \cdot \left[K_n \delta_{ij} + L_n (1 - \delta_{ij}) \right] \quad (9.33)$$

$$\overline{\overline{h_{C(V)\phi}^{edge}}} = \overline{\overline{h_{C(V)}^{edge}}} \cdot \left[K_0 \delta_{ij} + L_0 (1 - \delta_{ij}) \right] \quad (9.34)$$

tanımları ile (9.27) denklemindeki integrali

$$\int \frac{d^2 k_t}{(2\pi)^2} \overline{\overline{\phi(k_t) \cdot H_{C(V)} \cdot \phi(k_t)}} = \overline{\overline{h_{C(V)\phi}^{(0)}}} \cdot k_{z_{e(h)}}^2 + \overline{\overline{h_{C(V)\phi}^{(1)}}} \cdot k_{z_{e(h)}} + \overline{\overline{h_{C(V)\phi}^{(2)}}} + \overline{\overline{h_{C(V)\phi}^{edge}}} \quad (9.35)$$

şeklinde yazabiliriz. Buradaki kinetik enerji matrisleri çinko sülfür (“Zinc-Blende”) yapıdaki yarı iletkenler için **EK-5**'te verilmiştir.

Şimdi de $\int d^2\rho$ integrallerini hesaplayalım.

Burada $\int d^2\rho = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \rho d\rho$ dir. Birinci integral;

$$\left[\int d^2\rho \bar{\phi}^\dagger(\rho) \cdot \bar{I} \cdot \bar{\phi}(\rho) \right]_{ij} = 2\pi \int_0^\infty d\rho \frac{1}{\lambda_i^2} \frac{2}{\pi} \rho e^{-\frac{2\rho}{\lambda_i}} \delta_{ij} = \delta_{ij} \quad (\phi(\rho) \text{ 'nun normalizasyonunun sonucu})$$

$$\int d^2\rho \bar{\phi}^\dagger(\rho) \cdot \bar{I} \cdot \bar{\phi}(\rho) = \bar{I} \quad (9.36)$$

olur. İkinci integral ise;

$$\left[\int d^2\rho \bar{\phi}^\dagger(\rho) U_{coul}(|\vec{z}_e - \vec{z}_h|, \rho) \cdot \bar{I} \cdot \bar{\phi}(\rho) \right]_{ij} = -\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_{\theta w}} \frac{2}{\pi \lambda_i^2} \int_0^\infty d\rho \rho \underbrace{\frac{e^{-\frac{2\rho}{\lambda_i}}}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}}_{I_2} \delta_{ij} \triangleq \bar{U}_{C\phi,ij}$$

$$I_2 = -\frac{\pi |(z_e - z_h)|}{2} \left(BesselY \left[1, \frac{2|(z_e - z_h)|}{\lambda_i} \right] + StruveH \left[-1, \frac{2|(z_e - z_h)|}{\lambda_i} \right] \right) \quad (9.37)$$

$$\left(\bar{U}_{C\phi} \right)_{ij} \triangleq -\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_{\theta w}} \frac{2}{\pi \lambda_i^2} I_2 \delta_{ij} \quad (9.38)$$

şeklinde elde edilir. Burada *BesselY*, ikinci türden Bessel fonksiyonu $Y_n(z)$ 'yi ve *StruveH* da, Struve fonksiyonu $H_n(z)$ 'yi simgelemektedir.

Yukarıda hesapladığımız integraller (9.20) denkleminde yerine yazılırsa,

$$\begin{aligned}
& \left[\int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \left[\overline{h_{C\phi}^{(0)}} \cdot k_{z_e}^2 + \overline{h_{C\phi}^{(1)}} \cdot k_{z_e} + \overline{h_{C\phi}^{(2)}} + \overline{h_{C\phi}^{edge}} \right. \right. \\
& \left. \left. - \overline{h_{V\phi}^{(0)}} \cdot k_{z_h}^2 - \overline{h_{V\phi}^{(1)}} \cdot k_{z_h} - \overline{h_{V\phi}^{(2)}} - \overline{h_{V\phi}^{edge}} \right] \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right. \\
& + \int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \cdot W \bar{I} \cdot \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& \left. + \int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \overline{U_{C\phi}} \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right] \cdot \{ \bar{F} \} = 0
\end{aligned} \tag{9.39}$$

elde edilir. Burada $k_{z_e} = -i \frac{\partial}{\partial z_e}$, $k_{z_h} = -i \frac{\partial}{\partial z_h}$ dir ve Hermitliği sağlamak için

$$\frac{\partial^2}{\partial z_{e(h)}^2} \overline{h_{C(V)\phi}^{(0)}} \rightarrow \frac{\partial}{\partial z_{e(h)}} \overline{h_{C(V)\phi}^{(0)}} \frac{\partial}{\partial z_{e(h)}} \tag{9.40}$$

$$\frac{\partial}{\partial z_{e(h)}} \overline{h_{C(V)\phi}^{(1)}} \rightarrow \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z_{e(h)}} \overline{h_{C(V)\phi}^{(1)}} + \overline{h_{C(V)\phi}^{(1)}} \frac{\partial}{\partial z_{e(h)}} \right] \tag{9.41}$$

dönüşümleri yapılmalıdır. Dolayısıyla (9.39) denklemini

$$\begin{aligned}
& \left[\int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \left[-\frac{\partial}{\partial z_e} \overline{h_{C\phi}^{(0)}} \frac{\partial}{\partial z_e} - \frac{i}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z_e} \overline{h_{C\phi}^{(1)}} + \overline{h_{C\phi}^{(1)}} \frac{\partial}{\partial z_e} \right] + \overline{h_{C\phi}^{(2)}} + \overline{h_{C\phi}^{edge}} \right. \right. \\
& \left. \left. - \left(-\frac{\partial}{\partial z_h} \overline{h_{V\phi}^{(0)}} \frac{\partial}{\partial z_h} - \frac{i}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z_h} \overline{h_{V\phi}^{(1)}} + \overline{h_{V\phi}^{(1)}} \frac{\partial}{\partial z_h} \right] + \overline{h_{V\phi}^{(2)}} + \overline{h_{V\phi}^{edge}} \right) \right] \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right. \\
& \left. + \int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \cdot \left(W \bar{I} + \overline{U_{C\phi}} \right) \cdot \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right] \cdot \{ \bar{F} \} = 0
\end{aligned} \tag{9.42}$$

şekline dönüşür. Bu denklemdeki ikinci dereceden türevleri kısmi integrasyon kullanarak birinci dereceden türevlere dönüştürmeliyiz (Galerkin zayıf formülasyonu). Kısmi integrasyon uygulanıp arayüzey terimi atılınca (çalışma uzayımızın sınırlarında zarf fonksiyonumuz dolayısıyla biçim fonksiyonumuzun değeri sıfıra gider. Bu yüzden arayüzey terimini sıfır olarak alıyoruz.) (9.42) denklemini

$$\begin{aligned}
& \left[\int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \left[-\frac{i}{2} \overline{h_{C\phi}^{(1)}} \frac{\partial}{\partial z_e} + \overline{h_{C\phi}^{(2)}} + \overline{h_{C\phi}^{edge}} + \frac{i}{2} \overline{h_{V\phi}^{(1)}} \frac{\partial}{\partial z_h} - \overline{h_{V\phi}^{(2)}} - \overline{h_{V\phi}^{edge}} \right] \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right. \\
& + \int dz_e \int dz_h \frac{\partial \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}}{\partial z_e} \left(\overline{h_{C\phi}^{(0)}} \frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{i}{2} \overline{h_{C\phi}^{(1)}} \right) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& - \int dz_e \int dz_h \frac{\partial \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}}{\partial z_h} \left(\overline{h_{V\phi}^{(0)}} \frac{\partial}{\partial z_h} + \frac{i}{2} \overline{h_{V\phi}^{(1)}} \right) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& \left. + \int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \cdot \left(W \bar{I} + \overline{U_{C\phi}} \right) \cdot \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right] \cdot \{ \bar{F} \} = 0
\end{aligned} \tag{9.43}$$

şekline dönüşür. Burada

$$\begin{aligned}
\bar{K} = & \left[\int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \left[-\frac{i}{2} \bar{h}_{c\phi}^{(1)} \frac{\partial}{\partial z_e} + \bar{h}_{c\phi}^{(2)} + \bar{h}_{c\phi}^{edgse} + \frac{i}{2} \bar{h}_{v\phi}^{(1)} \frac{\partial}{\partial z_h} - \bar{h}_{v\phi}^{(2)} - \bar{h}_{v\phi}^{edgse} \right] \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \right. \\
& + \int dz_e \int dz_h \frac{\partial \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}}{\partial z_e} \left(\bar{h}_{c\phi}^{(0)} \frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{i}{2} \bar{h}_{c\phi}^{(1)} \right) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& - \int dz_e \int dz_h \frac{\partial \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}}{\partial z_h} \left(\bar{h}_{v\phi}^{(0)} \frac{\partial}{\partial z_h} + \frac{i}{2} \bar{h}_{v\phi}^{(1)} \right) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \\
& \left. + \int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \cdot \left(eFz_e - eFz_h + U_e(z_e) - U_h(z_h) \right) \bar{I} + \bar{U}_{c\phi} \right] \cdot \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \quad (9.44)
\end{aligned}$$

ve

$$\bar{M} = \int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \cdot \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \quad (9.45)$$

dir. Bir sonraki adım, tüm uzayı üçgenlere bölerek ve onların biçim fonksiyonlarını kullanarak $\iint dz_e dz_h$ integrallerini hesabını yapılabilir hale getirmektir. Hesaplanacak yedi farklı integral biçimi vardır.

$$\begin{aligned}
& \iint \left\{ N \bar{I} \right\} \bar{\Pi} \left\{ N \bar{I} \right\}^T dz_e dz_h, \iint \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}}{\partial z_e} \bar{\Pi} \left\{ N \bar{I} \right\}^T dz_e dz_h, \iint \left\{ N \bar{I} \right\} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}^T}{\partial z_e} dz_e dz_h \\
& \iint \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}}{\partial z_e} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}^T}{\partial z_e} dz_e dz_h, \iint \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}}{\partial z_h} \bar{\Pi} \left\{ N \bar{I} \right\}^T dz_e dz_h, \iint \left\{ N \bar{I} \right\} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}^T}{\partial z_h} dz_e dz_h \quad (9.46) \\
& \iint \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}}{\partial z_h} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N \bar{I} \right\}^T}{\partial z_h} dz_e dz_h
\end{aligned}$$

Yukarıdaki integraller $\bar{\Pi} = \overline{\text{Sabit}}$ durumunda hesaplandıktan sonra, geriye sadece $\bar{\Pi} = \bar{\Pi}(z_e, z_h)$ olduğu durumun integrali hesaplanmalıdır. Yani, alan, kuşatma ve Coulomb etkileşim potansiyelleri nedeniyle oluşan ekziton etkileşim integrali kalır. Bu integral, interpolasyon yardımıyla hesaplanır.

$$\int dz_e \int dz_h \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\} \left(W \bar{I} + \bar{U}_{c\phi} \right) \left\{ N(z_e, z_h) \bar{I} \right\}^T \longrightarrow \bar{\lambda} \text{ ve global elementlere}$$

bağlıdır.

Yukarıdaki terimin iyi bir şekilde kullanılması uygun hesaplanmış bir dalga fonksiyonunun bulunması için çok önemlidir. Bu integrallerin hesaplanması için yapılan işlemler **EK-4**'te verilmiştir.

Dolayısıyla genelleştirilmiş özdeğer denklemi varyasyon parametrelerine bağlı olarak aşağıdaki biçimde yazılır.

$$\left\{ \left\{ \overline{K} \right\} \right\} \left\{ \overline{F} \right\} = (E_x - E_g) \left\{ \left\{ \overline{M} \right\} \right\} \left\{ \overline{F} \right\} \quad (9.47)$$

Denklem (9.47)'nin MATLAB paket programı kullanılarak çözülmesiyle ekziton enerjisi ve dalga fonksiyonu belirlenebilir. Ekziton bağlanma enerjisi ise,

$$E_x^B = E_e + E_h + E_g - E_x \quad (9.48)$$

denklemleri yardımıyla bulunur. Burada E_x ekziton enerjisini, E_e elektronun enerjisini, E_h holün enerjisini simgelemektedir.

Bu çalışmada ekziton enerjisi ve dalga fonksiyonu 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı kullanılarak elde edildi. İletkenlik bandının birinci alt bandındaki elektronların valans alt bandındaki boşluklarla etkileşmesi sonucu kuantum kuyusunda oluşan ekzitonlar, valans bantlarındaki karakterlerine benzer şekilde isimlendirildi. Yani, valans bandında A sınıfı (A1, A2, ...) alt bantlardaki boşluk ile iletkenlik bandının en düşük enerjili alt bandındaki elektronun oluşturduğu ekziton A ekzitonu (A1 ekzitonu, A2 ekzitonu, ...) şeklinde isimlendirildi. Aynı şekilde valans bandında B sınıfı (B1, B2, ...) alt bantlardaki boşlukla iletkenlik bandındaki en düşük enerjili alt banttaki elektronun oluşturduğu ekziton da B ekzitonu (B1 ekzitonu, B2 ekzitonu, ...) şeklinde isimlendirildi. Çalışma uzayımızı en iyi şekilde üçgenlere bölmek için Per-Olof Persson'un doktora tezi [62] çalışmasından yararlandık. Uzayın en iyi şekilde üçgenlere bölme işlemi (mesh generation) ayrı bir çalışma konusu olduğundan bu çalışmada Persson'un yazdığı basit MATLAB kodlarını biraz değiştirerek kullandık [63].

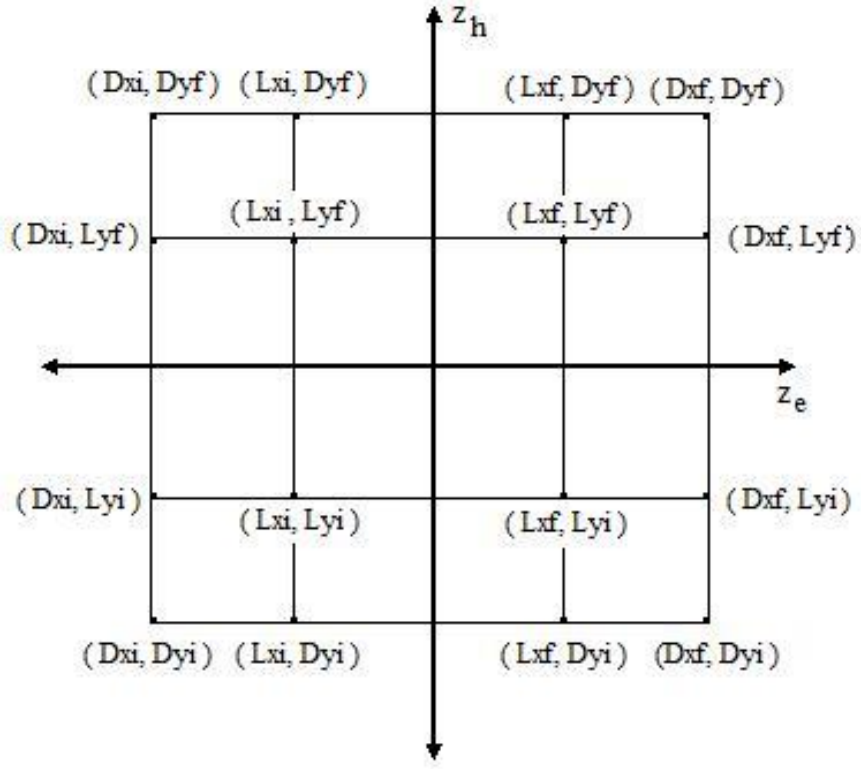
Ekziton hesaplarımızda her bir elementin büyüklüğünü sınırlamak için *hdata.hmax* isimli bir değişken atadık. Bu değişkenin büyüklüğü değiştirilerek uzayımızdaki toplam element sayısı değiştirilebilir. Örneğin, $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için *hdata.hmax = 6* aldığımızda uzayımızda toplam 8470 adet üçgen element ve 4364 tane nod oluşmaktadır. Oluşturulan üçgen elementlerin ortalama kalitesi 0.957 ve üçgen elementlerden minimum kaliteli olan ise 0.697'lik kaliteye sahiptir. Üçgen elementin kalitesi, ikizkenar üçgene yakınlığının bir ölçüsüdür ve ikizkenar üçgen olduğunda 1 değerini alır. Ayrıca *hdata.hmax = 6* durumunda uzayımızın sınır nodlarının sayısı 256'dır. Tüm ekziton hesaplarımızda toplam nod sayısının 4000'den fazla olmasını sağladık. Dolayısıyla, 4×4 'lük Luttinger-Kohn Hamiltonianı için K ve M matrislerinin en az $16\,000 \times 16\,000$ büyüklüğünde olmasına sebep oldu. Bu ise hesaplamalarımızdaki

hata miktarını oldukça azaltmıştır. Ayrıca yüksek kapasiteli bilgisayarlar ile bu büyüklükteki matrislerin hesabı fazla zaman almadan yapılabilmektedir.

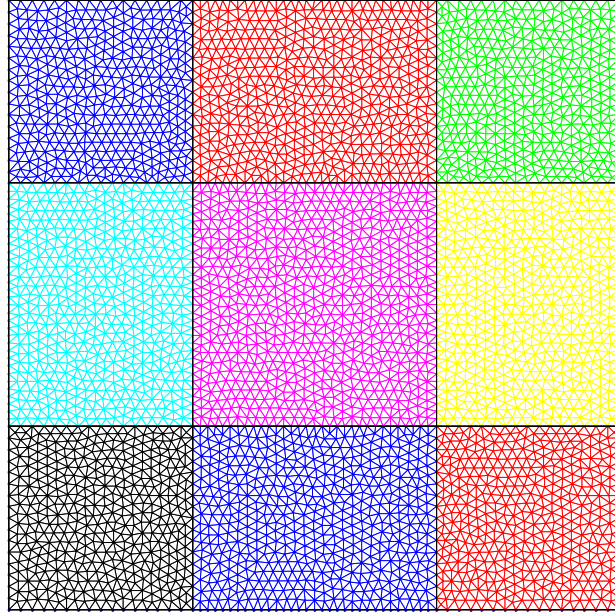
Çalışma uzayımızın her bölgesinde ilgili yarıiletken malzemenin fiziksel parametreleri alınarak hesaplamalar yapılmıştır. $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ kuantum kuyu sistemi için gerekli tüm fiziksel parametreler Ref. 39 ve Ref. 40'tan alınmıştır. Genelleştirilmiş özdeğer denklemini boyutsuz duruma getirilerek çözüm yapılmıştır. Bunun için denklem (9.47)'nin her iki tarafı $a_B^2 \cdot Ryd$ değerine bölünmüştür. Dolayısıyla tüm enerjiler serbest elektron Rydberg enerjisi (Ryd) ile, tüm uzunluklar da serbest elektron Bohr yarıçapı (a_B) ile boyutsuz hale getirilmiştir.

Şekil 9.1. (a)'da elektron ve boşluğun birbirini gördükleri uzayın şematik gösterimi verilmiştir. Şekil 9.1. (b)'de ise bu uzayın üçgenleştirme işlemi sonucundaki görünümü verilmiştir. Pembe renkli üçgen elementlerin bulunduğu bölge kuantum kuyusu bölgesidir. Diğer bölgeler ise potansiyel engellerinin bulunduğu bölgeleri ifade etmektedir. Kuantum kuyusunun genişliği L ve $Alfa = 2.5$ olmak üzere çalışma uzayımızın çeşitli noktalarının koordinatları aşağıdaki şekilde verilmiştir.

$$\begin{aligned}
 Dx &= Alfa * L; & Dy &= Alfa * L; \\
 Dxi &= -Dx/2; & Dxf &= Dxi + Dx; \\
 Dyi &= -Dy/2; & Dyf &= Dyi + Dy; \\
 Lxi &= -Lx/2; & Lxf &= Lxi + Lx; \\
 Lyi &= -Ly/2; & Lyf &= Lyi + Ly;
 \end{aligned}$$



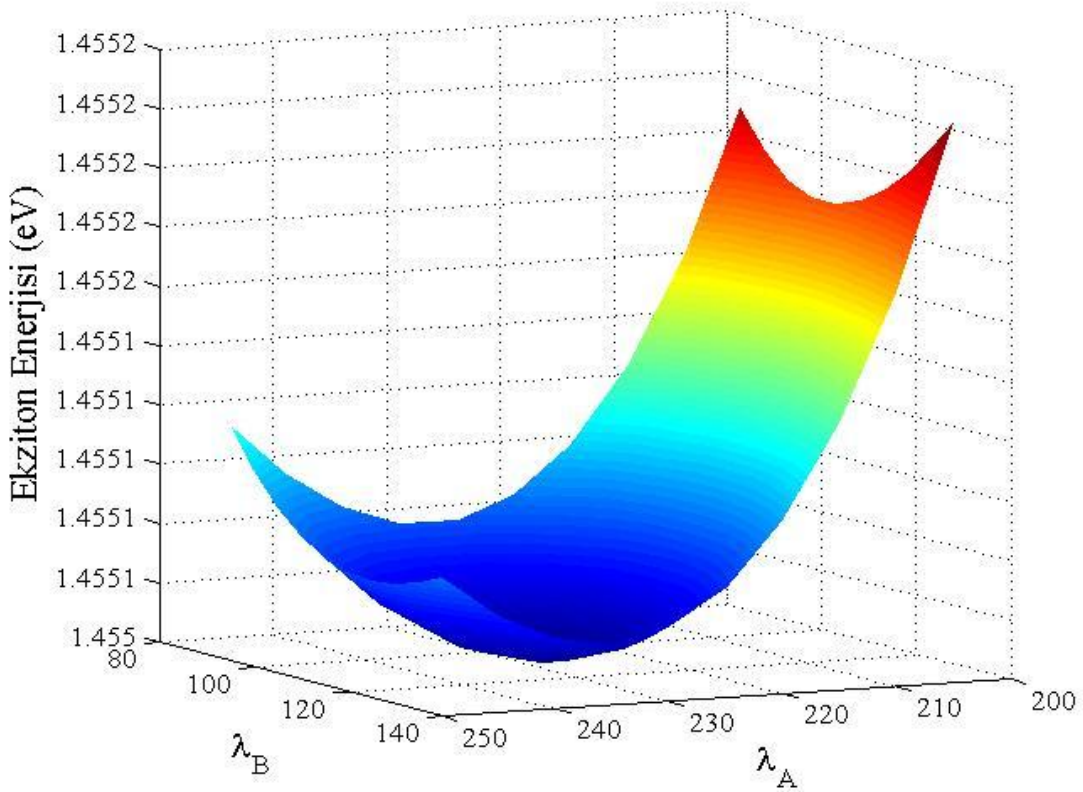
(a)



(b)

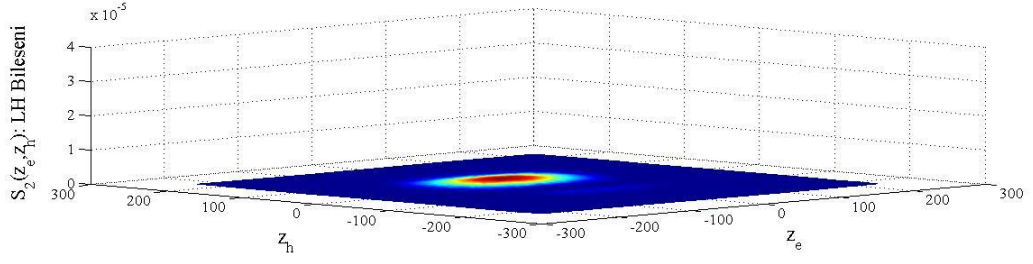
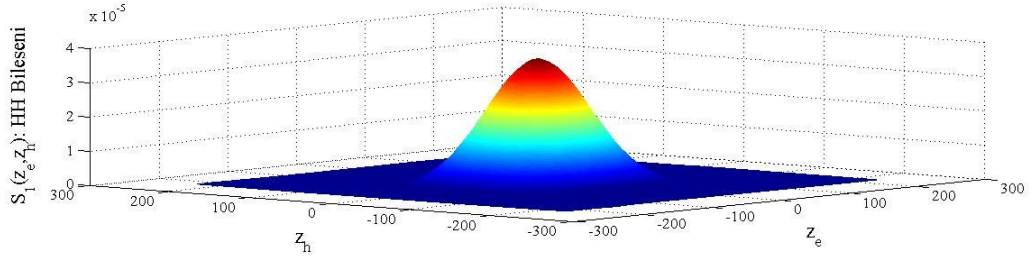
Şekil 9.1. (a) Elektron ve boşluğun koordinatları ile oluşturulan çalışma uzayının şematik gösterimi, (b) Üçgenleştirme işlemi yapıldıktan sonra çalışma uzayının görünümü

Valans bandı 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonian'ı ile tanımlandığından ekziton enerjisini minimize etmek için iki varyasyon parametresi kullanıldı. Bunlardan $\lambda_A \rightarrow hh$ enerjisini minimize etmek için $\lambda_B \rightarrow lh$ enerjisini minimize etmek içindir. Şekil 9.2.'de $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki taban durum ekziton enerjisinin varyasyon parametrelerine göre değişimi verilmiştir. Elektrik alan ve baskı altında $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun her bir farklı durumu için λ_A ve λ_B 'nin değerleri sırasıyla değiştirildi ve elde edilen ekziton enerjisinin grafiği Şekil 9.2.'deki gibi elde edildi. Daha sonra da bu şekle bakılarak ekziton enerjisinin minimum olduğu λ_A ve λ_B 'nin değerleri bulundu ve ekziton bağlanma enerjisi hesaplandı.

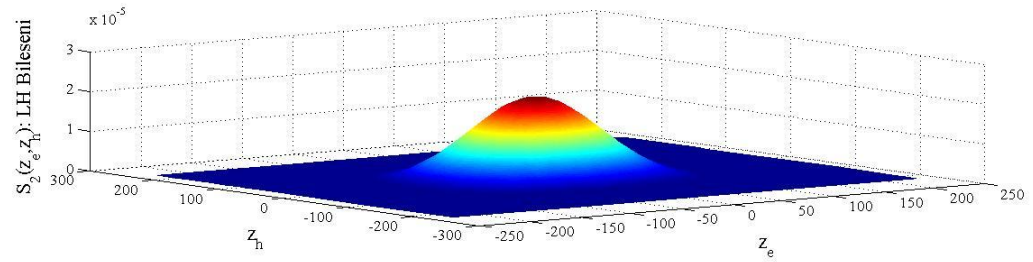
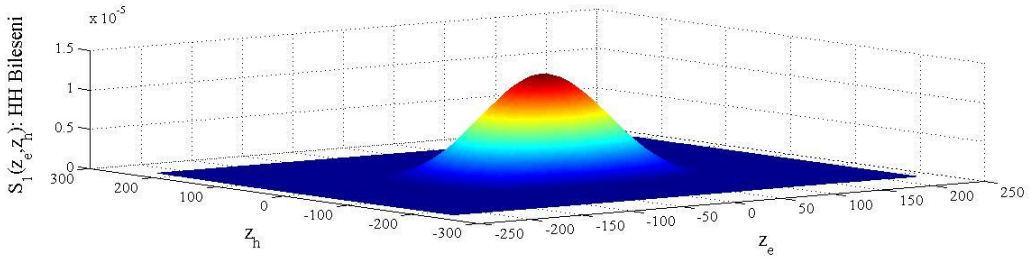


Şekil 9.2. Elektrik alan ve baskının olmadığı durumda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki taban durum ekziton enerjisinin boyutsuz varyasyon parametrelerine göre değişimi

Şekil 9.3.(a) 'da $S = 0$ durumunda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda ekziton zarf fonksiyonunun bileşenleri, Şekil 9.3. (b)'de ise [100] doğrultusunda $S = 10$ kbar'lık baskı uygulanması durumunda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda ekziton zarf fonksiyonunun bileşenleri gösterilmiştir. Şekil 9.3. (a)'da ilk ekziton enerjisine karşılık gelen ekziton zarf fonksiyonunun bileşenlerinden sadece HH bileşeni (A sınıfı alt bant) olduğundan bu ekzitona A ekzitonu denilmiştir. Şekil 9.3. (b)'de ilk ekziton enerjisine karşılık gelen ekziton zarf fonksiyonunun her iki bileşene de sahip olduğu görülmektedir. Bu yüzden ağırlıklı olan bileşenin (LH bileşeni (B sınıfı alt bant) %63.33, HH bileşeni (A sınıfı alt bant) ise %36.67 ağırlıklı orana sahip) valans alt bandına ait etiketle isimlendirme yapılarak B ekzitonu denilmiştir. Baskı altında valans bandında alt bantlar HH ve LH bileşenleri içerdiğinden ve sistemin Hamiltonian'ındaki "Coulombic" terimden dolayı ekziton zarf fonksiyonu A ve B bileşenlerini içermektedir.

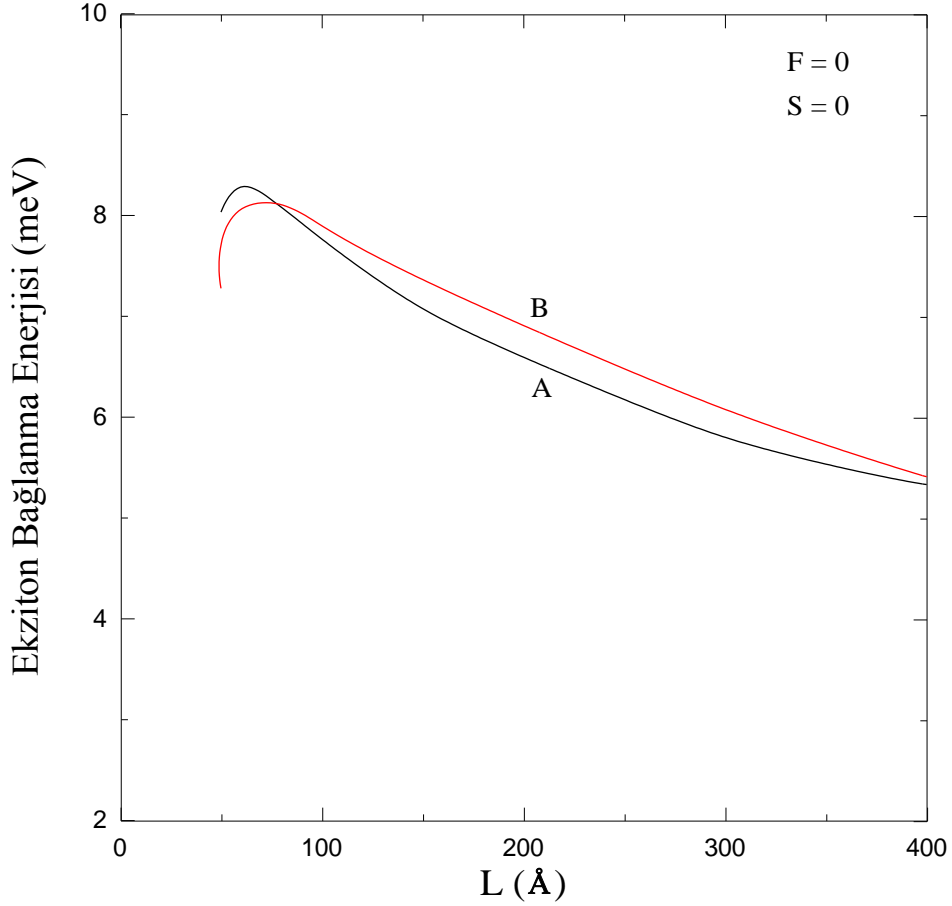


(a)



(b)

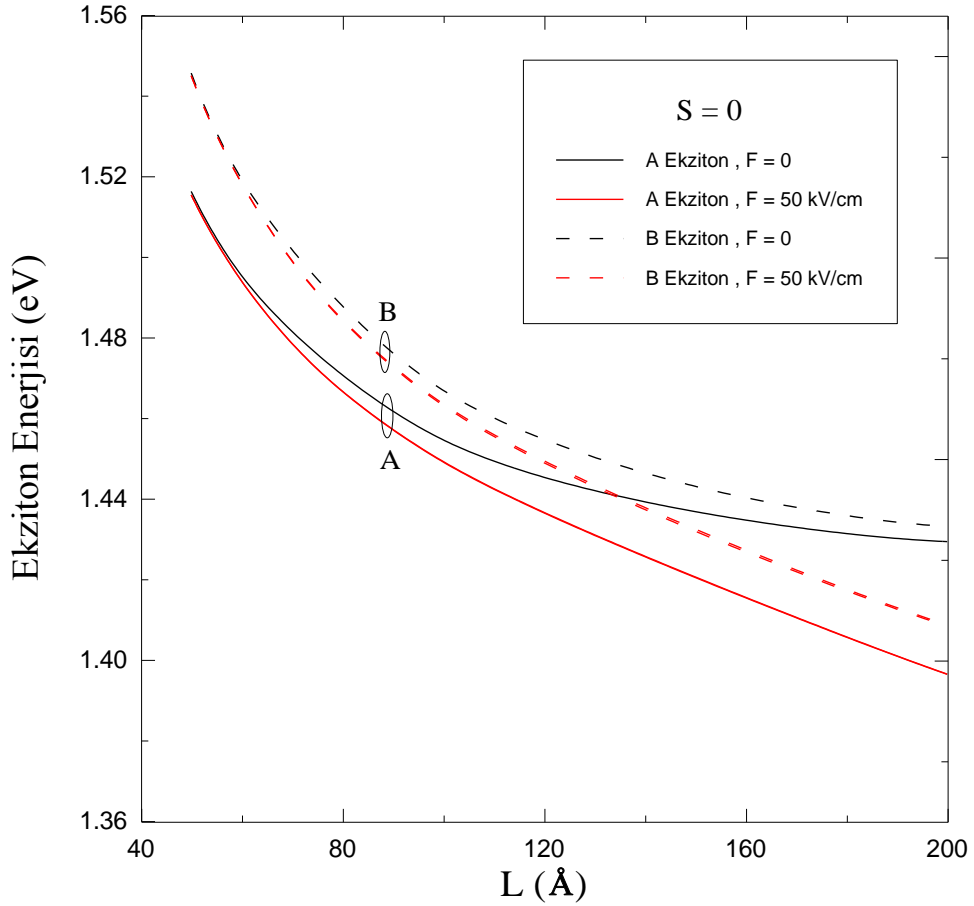
Şekil 9.3. (a) $S = 0$ durumunda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda ekzitron zarf fonksiyonunun bileşenleri, (b) $S||[100]$ doğrultusunda $S = 10$ kbar'lık baskı uygulanması durumunda $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda ekzitron zarf fonksiyonunun bileşenleri.



Şekil 9.4. *GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi

Şekil 9.4.'te elektrik alan ve baskının olmadığı durumda *GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunda ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Burada A ve B ekzitonları iki katlı dejeneredir. A1, A2 ekzitonu yerine A ekzitonu, B1, B2 ekzitonu yerine de B ekzitonu denilmiştir. Bağlanma enerjisi kuyu genişliğinin azalmasıyla önce artış gösterirken, sonra azalmaya başlar. Bu davranışı göz önüne alarak; küçük L değerlerinde “Coulombic” problemin sözde iki boyutlu özelliği artar. Parçacıkların kuşatılmış enerjileri engel yüksekliğine ulaştığında iki boyutlu davranışlarının bozulmasından dolayı tekrar üç boyutlu davranış gösterirler. Büyük L değerlerinde ise, sözde iki boyutluluk bozulmakta ve ekziton üç boyutlu uzaydaki gibi davranmaya başlamaktadır. Ayrıca şekle bakıldığında büyük L değerlerinde B ekzitonunun bağlanma enerjisi, A ekzitonunun bağlanma enerjisinden büyük olduğu görülmektedir. L değerinin daha da azalması ile B ekzitonunun bağlanma enerjisi A ekzitonunun bağlanma enerjisinden daha küçük değer aldığı görülmektedir. Bu davranışı anlamak kolaydır. L değeri azaldıkça ekziton zarf fonksiyonu kuyu içinde

sıkışmaya başlar ve bağlanma artar. A ekzitonuna göre, B ekzitonunun zarf fonksiyonunun bariyerlere sızması daha büyük L değerlerinde meydana geldiğinden B ekzitonunun bağlanma enerjisi daha önce azalmaktadır ve bundan dolayı da A ekzitonunun bağlanma enerjisinden daha küçük bir değer almaktadır.



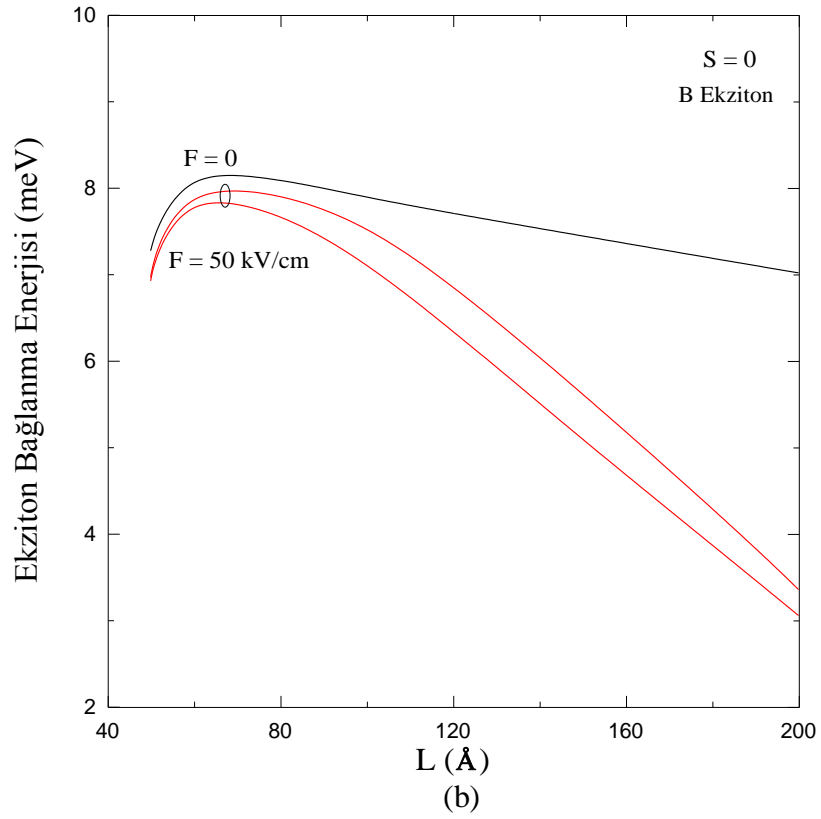
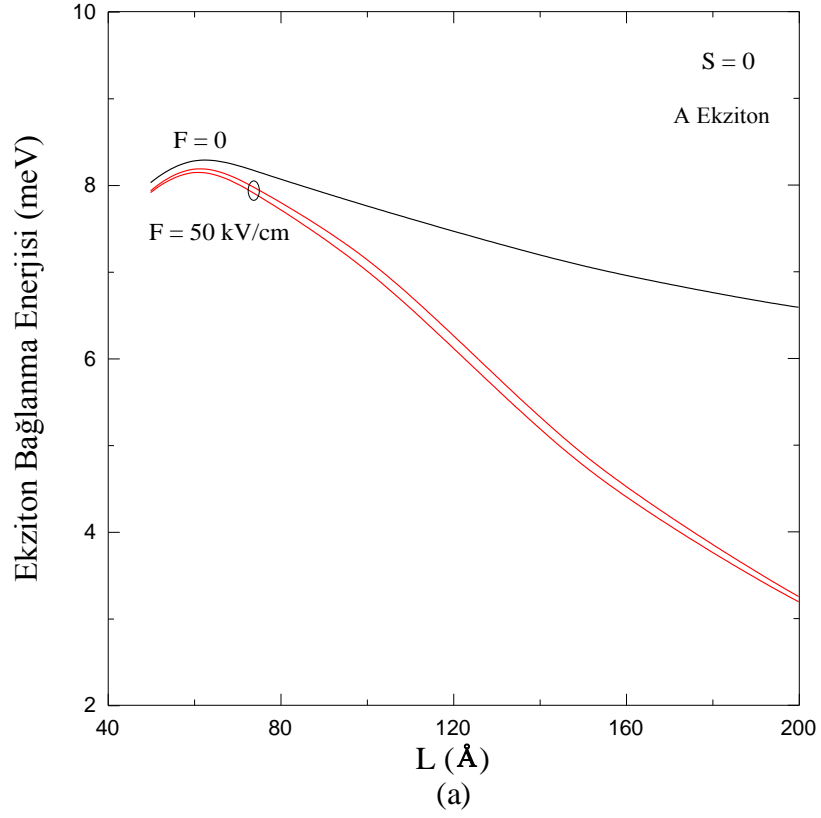
Şekil 9.5. Elektrik alan altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi

Şekil 9.5.'te elektrik alan altındaki $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için A (A1, A2) ve B (B1, B2) ekzitonlarının enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Sürekli çizgiler A ekzitonunun, kesikli çizgiler de B ekzitonunun enerjisini ifade etmektedir. Siyah renkle $F = 0$ durumunda ekziton enerjileri, kırmızı renkle ise $F = 50 \text{ kV/cm}$ durumundaki ekziton enerjileri belirtilmiştir. Ekziton enerji spektrumunda taban durumdaki ekziton enerjisi, iletkenlik alt bandının taban durumdaki elektron ile valans bandının ilk durumunda (A1, A2) bulunan boşluk

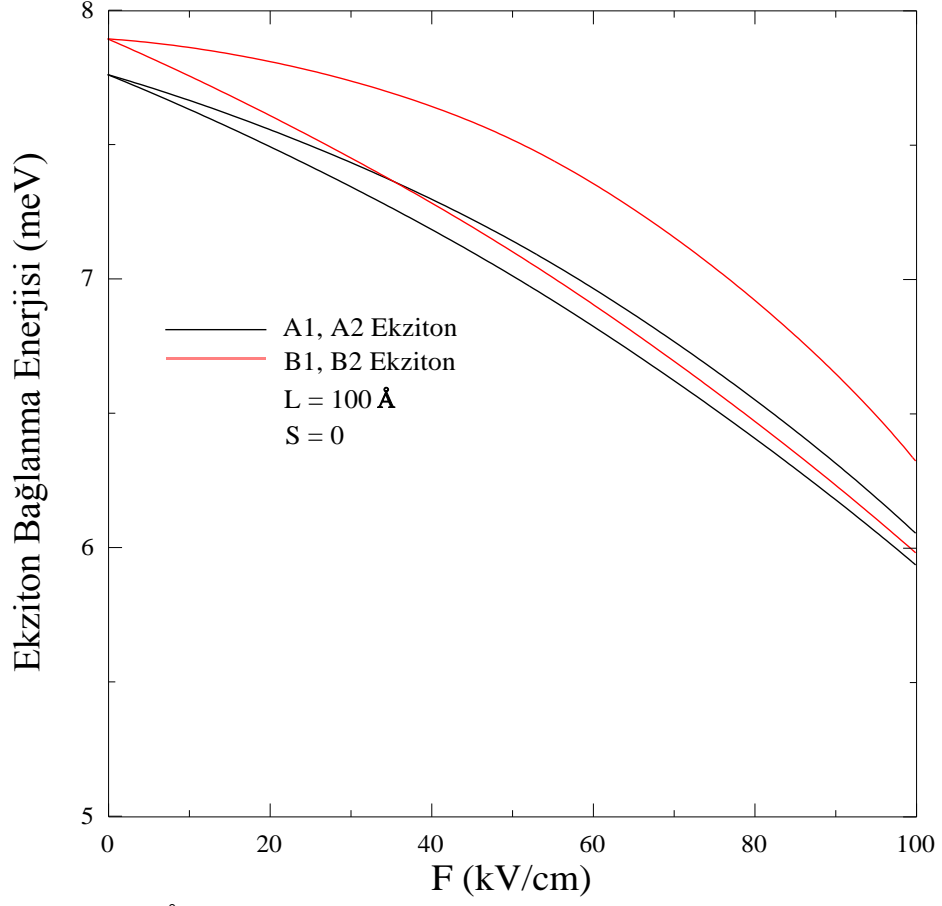
tarafından oluşturulan ekzitona karşılık gelmektedir. Ekziton enerji spektrumundaki ikinci ekziton enerjisi ise, iletkenlik alt bandının taban durumundaki elektron ile valans bandının ikinci durumunda (B1, B2) bulunan boşluk tarafından oluşturulan ekzitona karşılık gelmektedir. Bu yüzden taban durumundaki ekziton enerjisi A ile, ikinci durumundaki ekziton enerjisi de B ile gösterilmiştir. Şekle bakıldığında, her iki ekzitonun enerjisinin kuyu genişliğinin artması ile azaldığı görülmektedir. Kuyu genişliğinin artması, elektron ve boşluk enerjilerinin azalmasına sebep olmakta ve dolayısıyla da ekziton enerjisi kuyu genişliğinin artması ile azalmaktadır. Elektrik alan altında elektron ve boşlukların enerjileri azaldığından ekziton enerjisi de azalmaktadır. Büyük kuyu genişliklerinde elektron ve boşlukların enerjileri elektrik alana daha duyarlı olduğundan, ekziton enerjileri büyük L değerlerinde elektrik alanın uygulanması ile daha çok azalmaktadır.

Şekil 9.6.'da elektrik alan altındaki $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi, (a) A Ekzitonu, (b) B Ekzitonu için gösterilmiştir. Şekle bakıldığında, ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğinin artması ve elektrik alanın uygulanması ile azaldığı görülmektedir. Azalma miktarı kuyu genişliğinin artmasıyla artmaktadır. Bunun nedeni, kuyu genişliğinin artması ile elektron ve boşluk uzayın farklı bölgelerinde lokalize olması ve dolayısıyla da birbirini görme olasılığının (overlabin) azalmasıdır. Ayrıca bu şekillerde elektrik alanın uygulanması ile ekziton bağlanma enerjisindeki dejenerasyonun ortadan kalktığı görülmektedir. Elektrik alanının uygulanması ile alt bantlarda inversiyon simetrisi bozulur ve ekziton enerjisindeki dejenerasyon ortadan kalmaktadır. Bu nedenle alan altında ekziton bağlanma enerjisindeki dejenerasyon ortadan kalkar ve ekziton bağlanma enerjisi ikiye ayrılmaktadır. Dolayısıyla B ekzitonu, B1 ve B2 ekzitonu şeklinde, A ekzitonu ise A1 ve A2 şeklinde ikiye ayrılmaktadır.

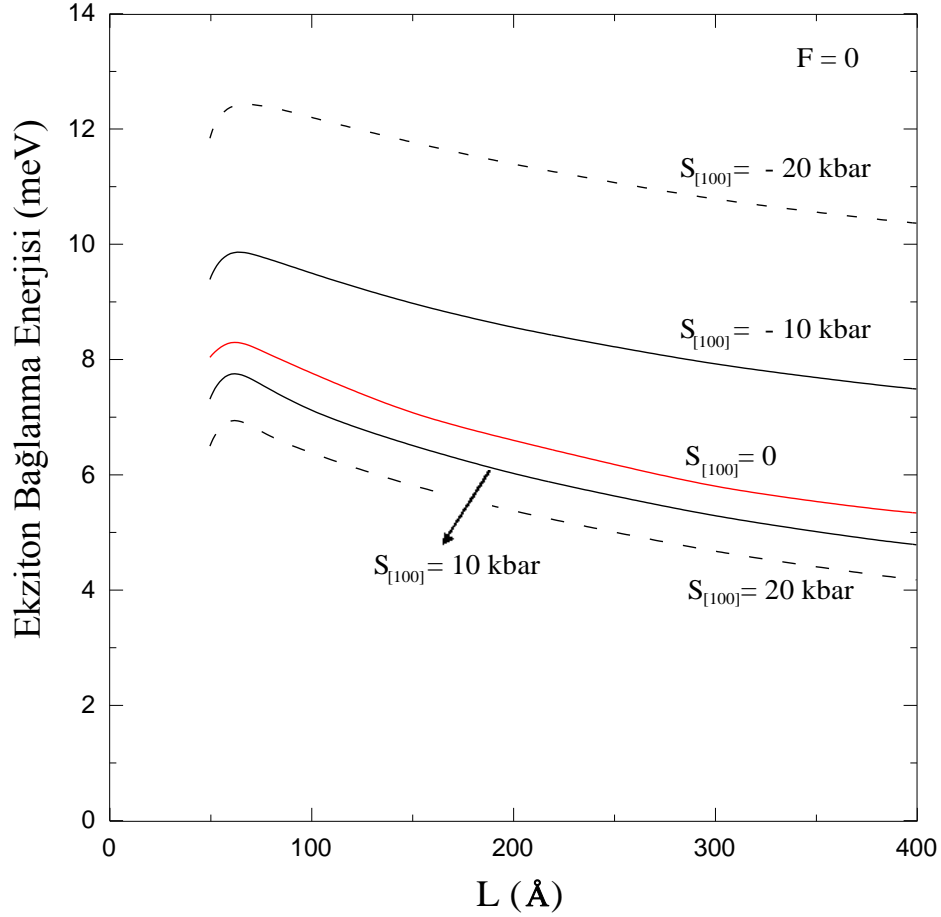
Şekil 9.7.'de $L = 100 \text{ \AA}$ luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimi verilmiştir. Bu şekle bakıldığında, ekziton bağlanma enerjilerinin elektrik alanın artması ile azaldığı ($\sim 2 \text{ meV}$) açıkça görülmektedir. Elektrik alanın büyüklüğünün artması ile bu azalışın nedeni yukarıda açıklandığı gibi, elektron ve boşluğun aynı düzlemde bulunma olasılığının (overlabin) azalmasıdır. Elektrik alanın tüm değerlerinde B1 ve B2 ekziton bağlanma enerjileri arasındaki fark, A1 ve A2 ekziton bağlanma enerjileri arasındaki farktan daha büyüktür.



Şekil 9.6. Elektrik alan altındaki $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi, (a) A Ekzitonu için, (b) B Ekzitonu için.

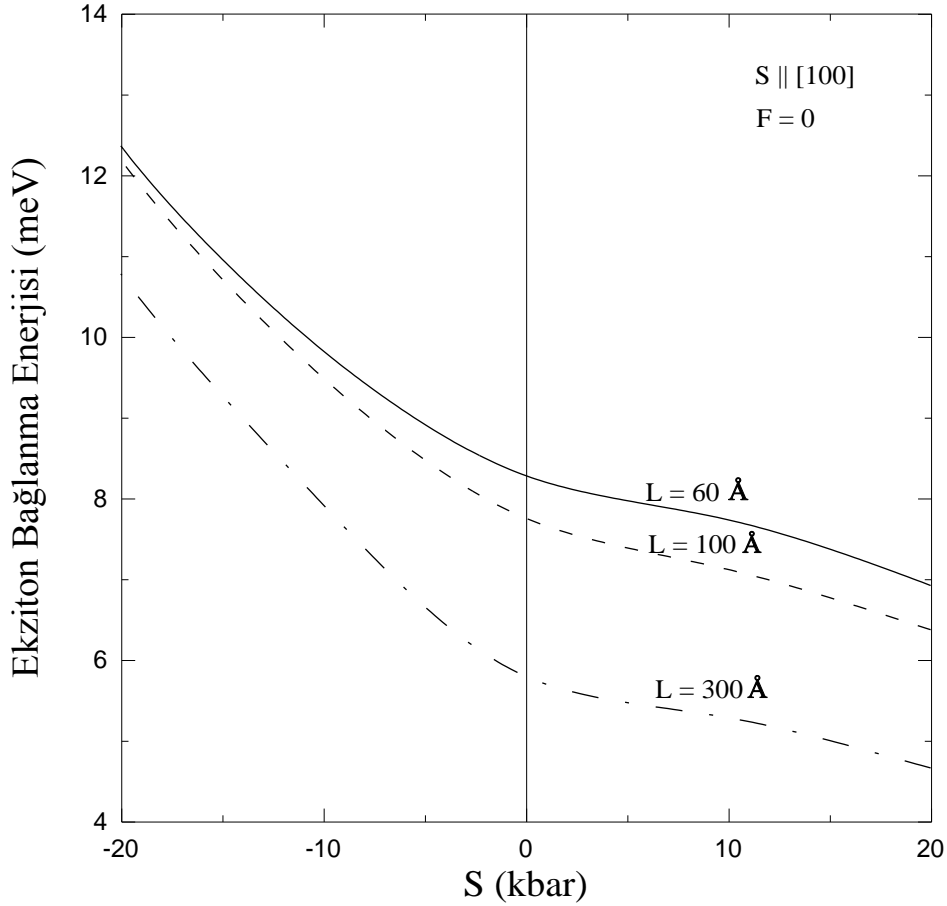


Şekil 9.7. $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin elektrik alana göre değişimi.



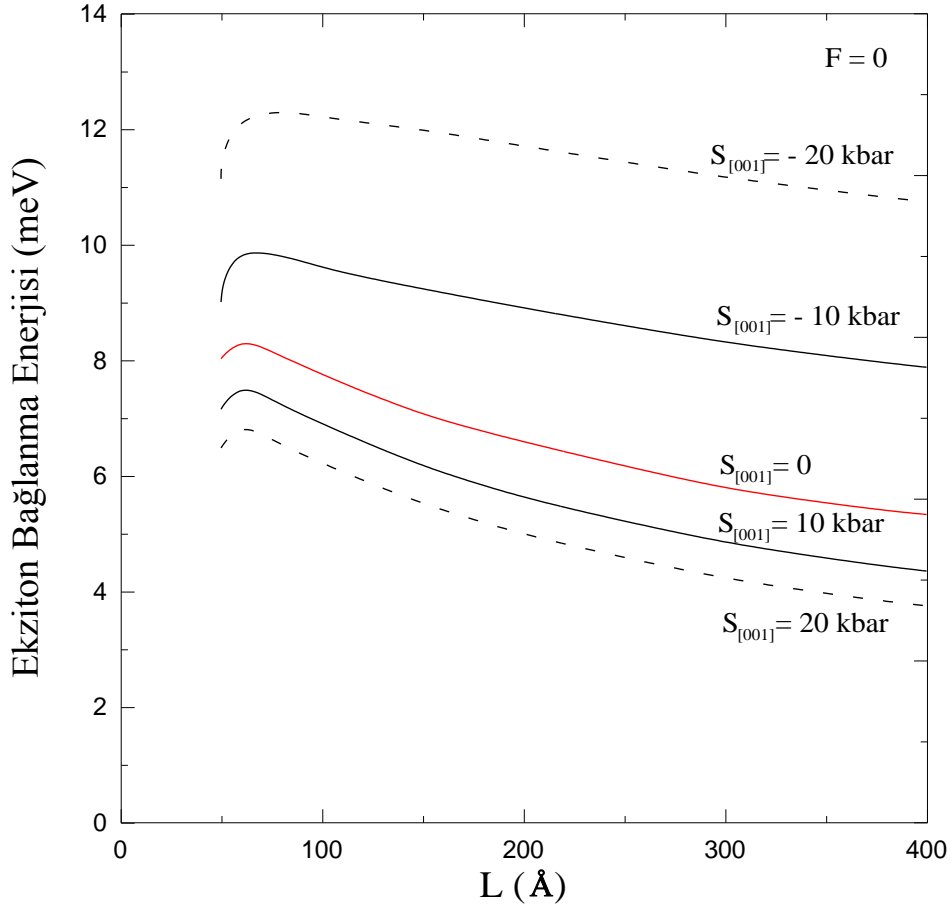
Şekil 9.8. (a) $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 9.8.(a)'da $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Baskının pozitif ve negatif değerlerinde ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı davranışı genel olarak aynıdır. Pozitif baskı altında ekziton bağlanma enerjisi azalırken, negatif baskı altında artmaktadır. Ayrıca pozitif baskı altında kuyu genişliğinin $60 - 400 \text{ \AA}$ aralığında değişmesi ile ekziton bağlanma enerjisinin değişimi $S = 0$ durumu ile aynı (değişim $\sim 3 \text{ meV}$) iken, negatif baskı altında azalmıştır (değişim $\sim 1.5 \text{ meV}$ 'dir). $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı durumunda en düşük enerjili ekziton B ekzitonu iken, negatif baskı altında en düşük enerjili ekziton A ekzitonudur. Bundan dolayı da $S = 0$ durumuna göre bağlanma enerjilerinin değişim miktarları farklıdır.



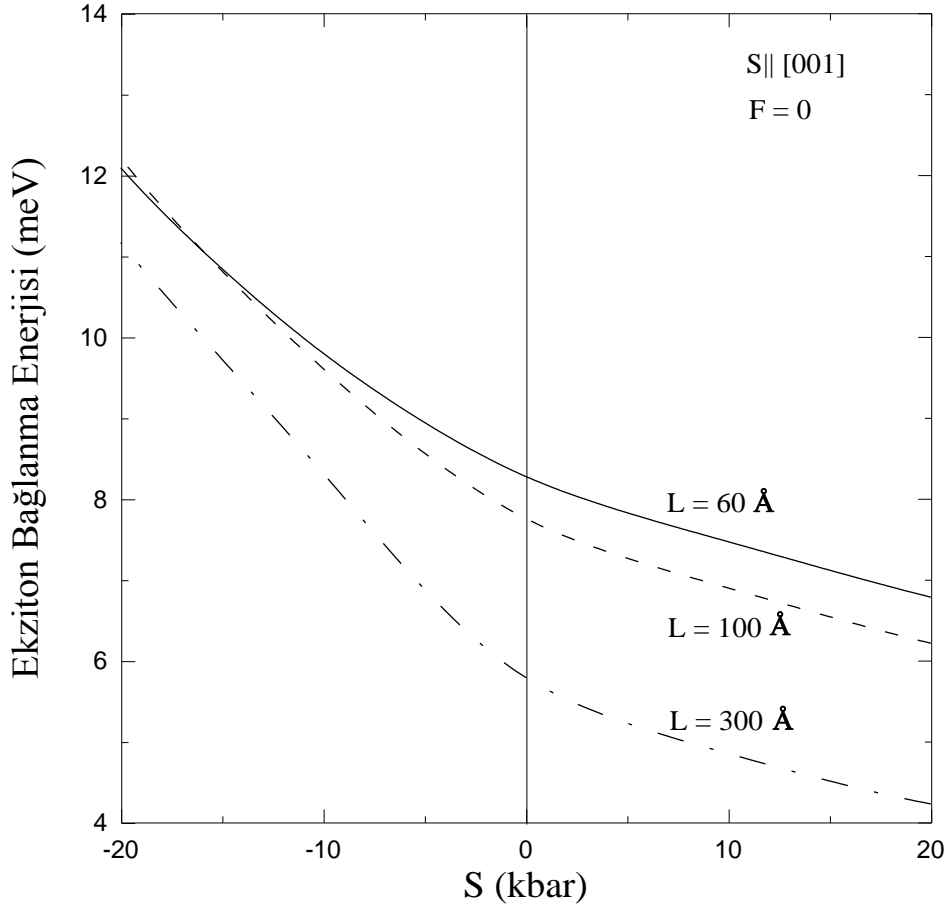
Şekil 9.8. (b) $S \parallel [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 9.8.(b)'de $S \parallel [100]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi farklı L değerleri için verilmiştir. Her üç L değeri için, pozitif baskının artması ile en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisi azalmaktadır ve pozitif baskının 0'dan 20 $kbar$ 'a çıkması ile ekziton bağlanma enerjisinin değişimi yaklaşık olarak aynıdır ($\sim 1.5 meV$). Negatif baskının artması ile en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisi her üç L değeri için artmaktadır. Ayrıca negatif baskının 0'dan $-20 kbar$ 'a çıkması ile bağlanma enerjisindeki değişim her bir L değeri için farklıdır. Örneğin, $L = 300 \text{ Å}$ için $\sim 5 meV$ iken, $L = 60 \text{ Å}$ için $\sim 4 meV$ 'dir.



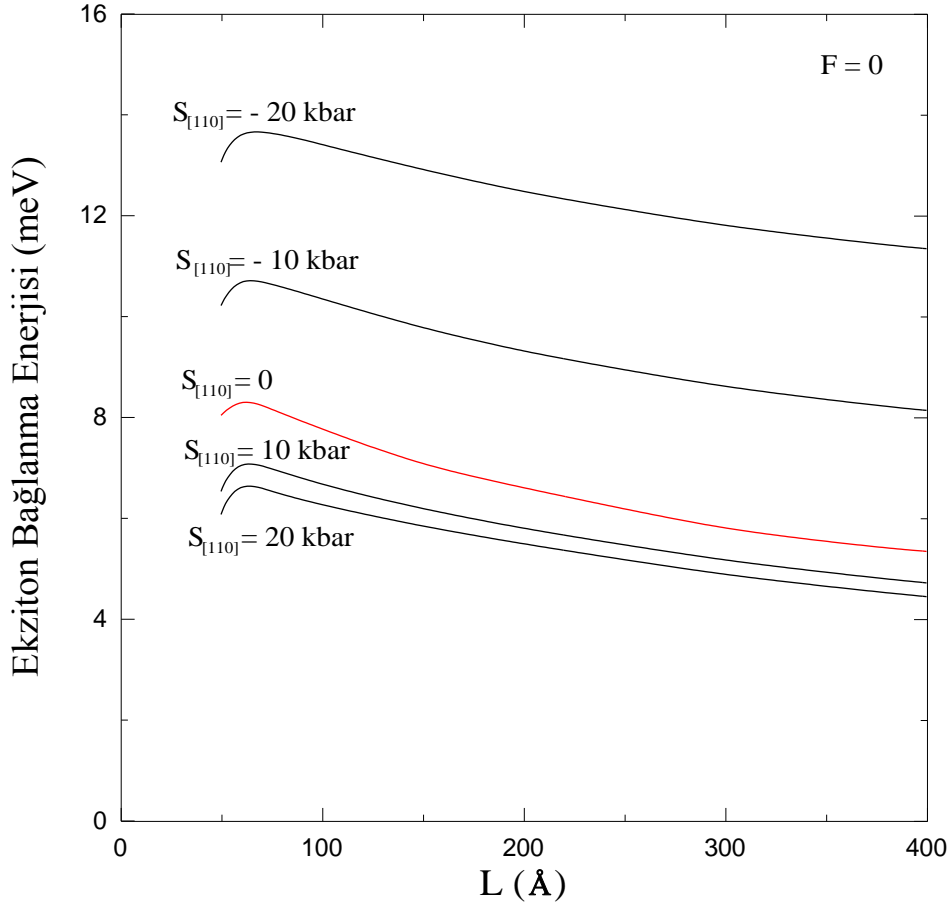
Şekil 9.9. (a) $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 9.9.(a)'da $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Burada en düşük enerjili ekziton durumu $S||[100]$ durumundakinin tam tersidir. Yani, $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı için en düşük enerjili ekziton B ekzitonu iken, $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı için ise A ekzitonudur; $S||[100]$ doğrultusunda uygulanan negatif baskı durumunda ise en düşük enerjili ekziton A ekzitonu iken, $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı için ise B ekzitonudur. Ekziton enerjisinin kuyu genişliğine göre genel davranışı yine önceki durumun benzeridir. Pozitif baskının artması ile bağlanma enerjisi azalmakta ve negatif baskının artması ile ise bağlanma enerjisi artmaktadır. Bu durumun önceki durumdan tek farkı, ekziton bağlanma enerjisi değerlerinin biraz farklı olmasıdır.



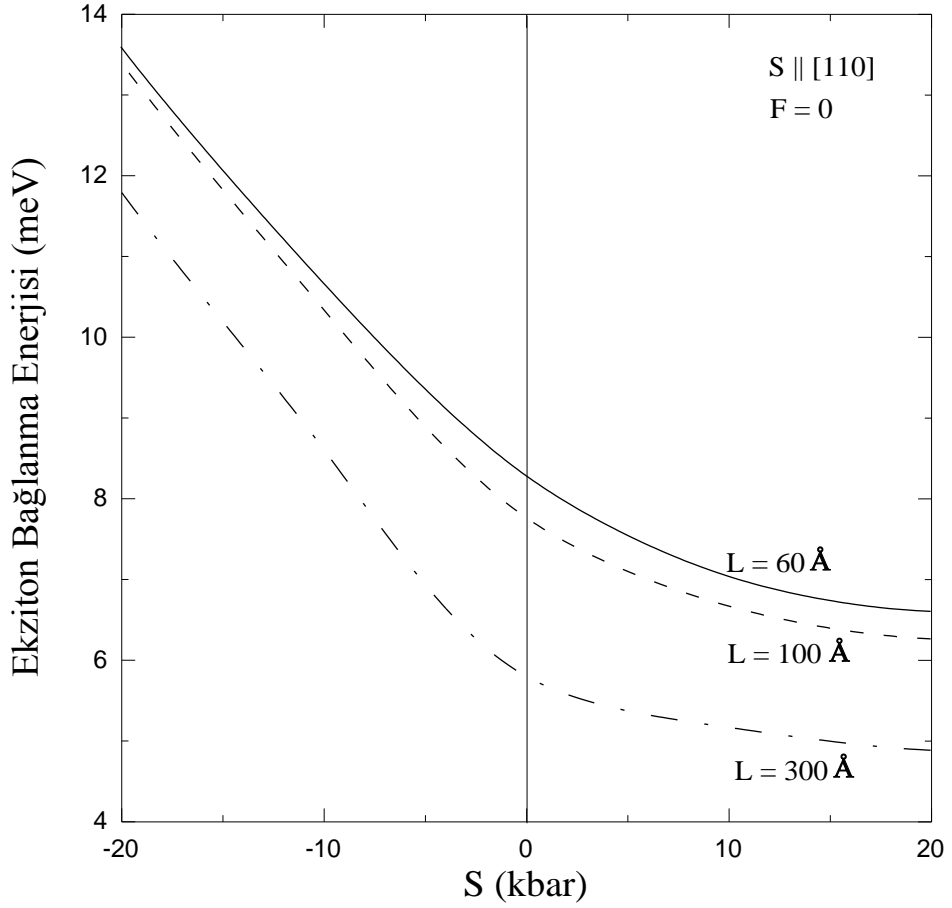
Şekil 9.9. (b) $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 9.9.(b)'de $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi verilmiştir. L 'nin üç değeri için de pozitif baskının artması ile ekziton bağlanma enerjisi azalmaktadır. Negatif baskının artmasıyla ise, ekziton bağlanma enerjisi artmaktadır. Burada ekziton enerjisinin artış miktarı büyük L değerleri için daha fazladır. $S||[100]$ durumuna göre buradaki artış miktarı biraz daha büyüktür. Bunun nedeni baskının kuantum kuyusunun büyültme doğrultusunda uygulanmasıdır.



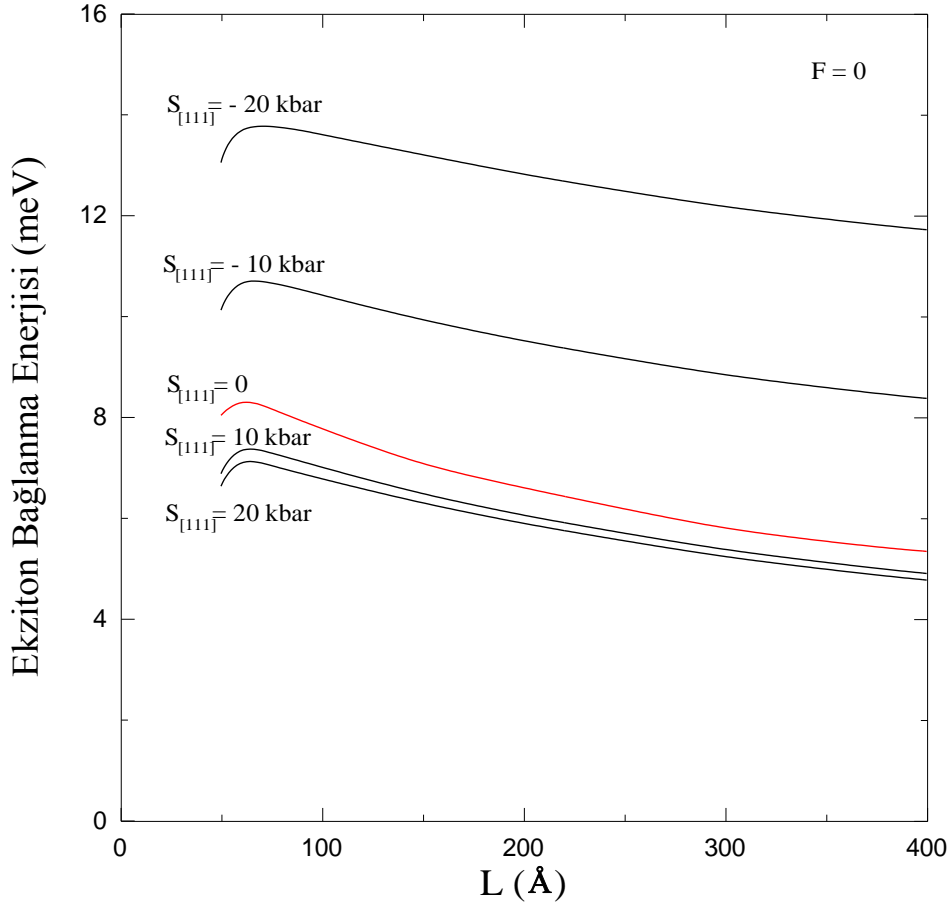
Şekil 9.10. (a) $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 9.10.(a)'da $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı altında en düşük enerjili ekziton B ekzitonu iken, negatif baskı altında A ekzitonu en düşük enerjili ekzitondur. Bu doğrultudaki baskı için de bağlanma enerjisinin kuyu genişliği ile değişimi daha önceki grafiklere benzerdir. Buradaki farklılık, ekziton enerjisinin $S = 0$ durumuna göre baskı ile daha fazla değişmesidir. Ayrıca pozitif baskı altında ekziton bağlanma enerjisinin azalma miktarı, negatif baskı altındaki ekzitonun bağlanma enerjisinin artma miktarından küçüktür.



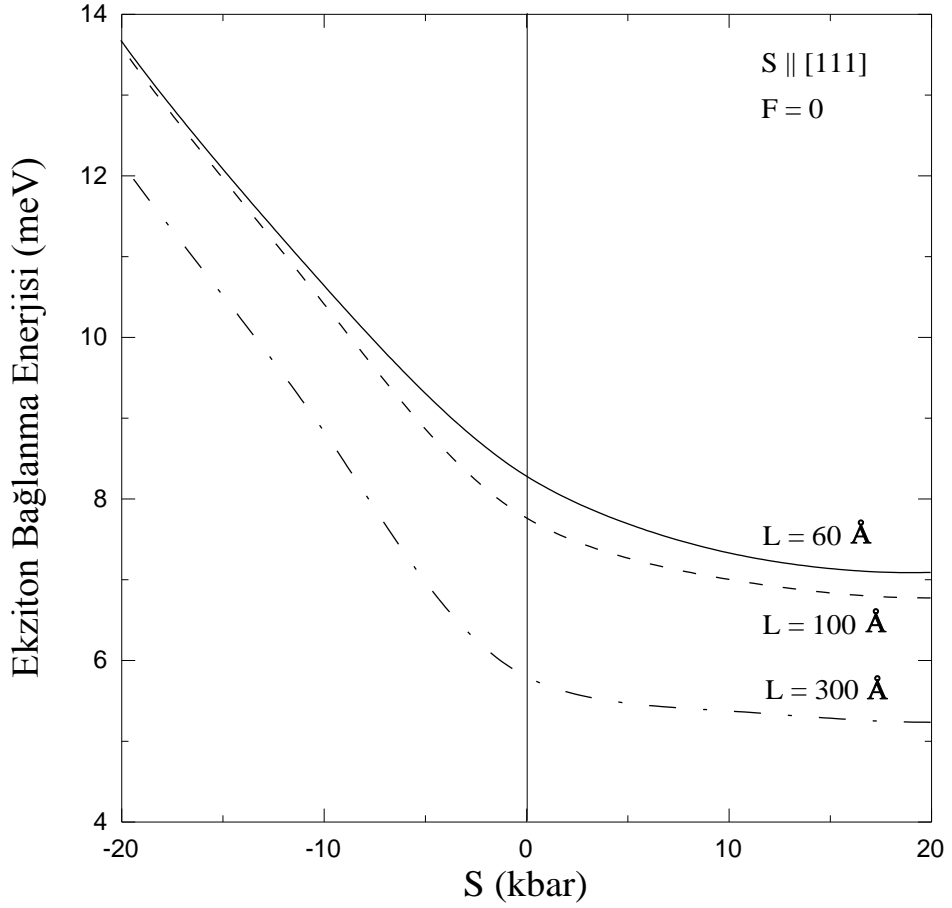
Şekil 9.10. (b) $S \parallel [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 9.10.(b)'de $S \parallel [110]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi gösterilmiştir. Bu doğrultudaki pozitif baskı için her L değerinde bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. Negatif baskı durumunda ise bağlanma enerjisinin çok hızlı bir biçimde arttığı görülmektedir. Negatif baskı durumunda ekziton bağlanma enerjileri $L = 300 \text{ \AA}$ için $\sim 6 \text{ meV}$, $L = 60 \text{ \AA}$ için $\sim 5 \text{ meV}$ artmaktadır. Bu daha önceki baskı doğrultularındaki bağlanma enerjilerinin artma miktarından daha büyüktür.



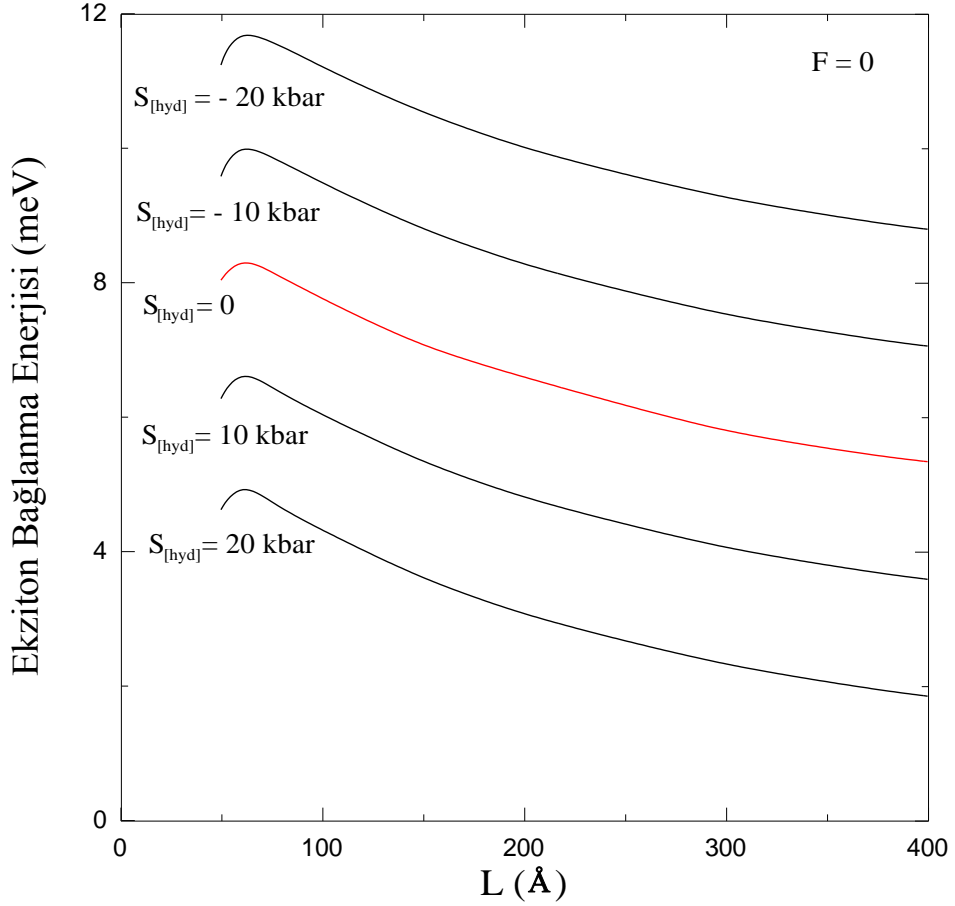
Şekil 9.11. (a) $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 9.11.(a)'da $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Buradaki genel davranış daha önceki davranışlara benzerdir. Burada da baskının doğrultusundan dolayı ekziton bağlanma enerjilerinin değerlerinde farklılıklar vardır. $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan pozitif ve negatif baskı altında en düşük enerjili ekziton A ekzitonudur.



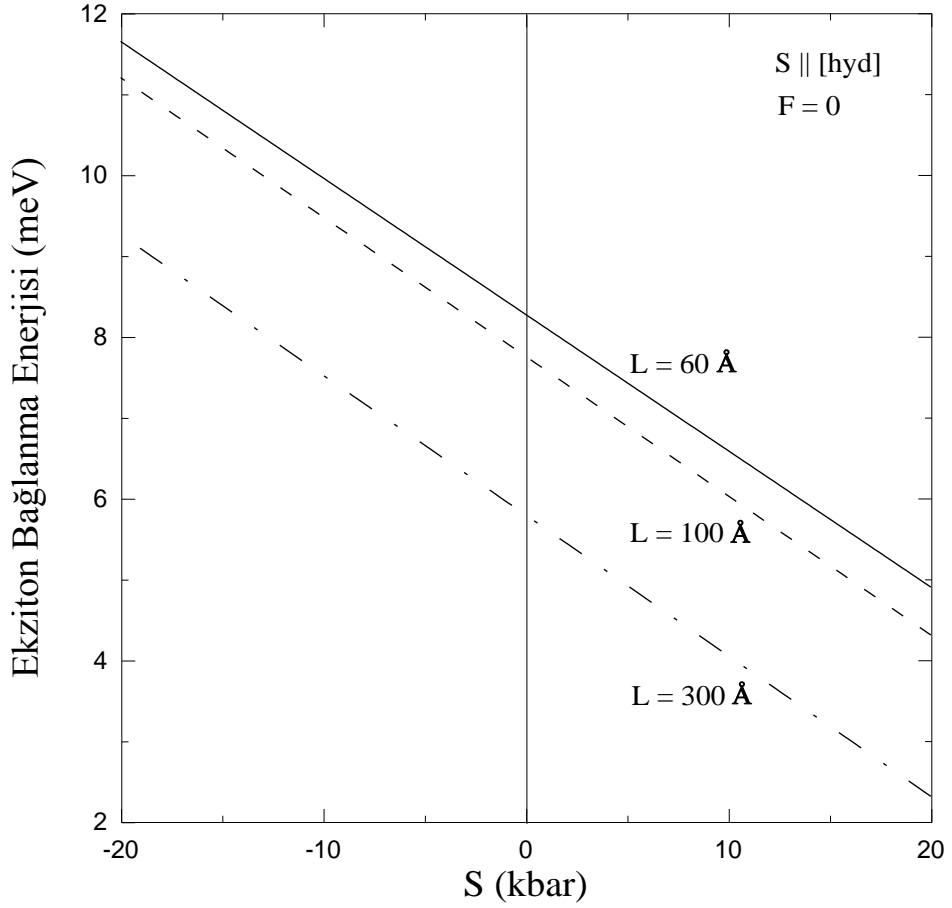
Şekil 9.11. (b) $S \parallel [111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 9.11.(b)'de $S \parallel [111]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi gösterilmiştir. Küçük L değerlerinde pozitif baskının artması ile bağlanma enerjisi büyük L değerlerine göre daha hızlı azalmaktadır. Negatif baskı durumunda ekziton bağlanmanın hızlı bir şekilde arttığı görülmektedir. Bu artış miktarı pozitif baskıdaki azalma miktarından yaklaşık olarak 5 veya 6 kat daha büyüktür.



Şekil 9.12. (a) Hidrostatik baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi.

Şekil 9.12.(a)'da hidrostatik baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda en düşük enerjili ekzitonun bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine göre değişimi verilmiştir. Hem pozitif hem de negatif hidrostatik baskı altındaki kuantum kuyusunda en düşük enerjili ekziton A ekzitonudur. Burada tüm baskı değerleri için ekziton bağlanma enerjilerinin kuyu genişliği ile değişimi $S = 0$ durumundaki değişiminin aynısıdır. Sadece baskının pozitif veya negatif olmasına göre ya yukarı kayma ya da aşağıya doğru bir kayma söz konusudur. Şekilden pozitif baskı altında bağlanmanın azaldığı, negatif baskı altında ise arttığı görülmektedir.



Şekil 9.12. (b) Hidrostatik baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi.

Şekil 9.12.(b)'de hidrostatik baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusu için ekziton bağlanma enerjisinin baskı büyüklüğüne göre değişimi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, pozitif hidrostatik baskı altında tüm L değerlerinde ekziton bağlanma enerjisi lineer olarak azalmaktadır. Negatif hidrostatik baskı altında ise, tüm L değerlerinde ekziton bağlanma enerjisi lineer olarak artmaktadır. Bunun nedeni, hidrostatik pozitif ya da negatif baskı altında iletkenlik ve valans alt bantların enerjilerinin lineer olarak artması veya azalmasıdır. Alt bant enerjilerinin lineer olarak artması ya da azalması etkin bant aralığının (E_g) artması ya da azalmasını sağlayarak ekziton bağlanmayı değiştirmektedir.

10. ELEKTRİK ALAN VE BASKI ALTINDA $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ TEK KUANTUM KUYUSUNDA EKZİTON SOĞURMA

SI birim sisteminde soğurma katsayısı [64],

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 \omega V} \sum_{i,f} |\hat{e} \cdot \vec{p}_{fi}|^2 \cdot \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \cdot [f(E_i) - f(E_f)] \quad (10.1)$$

şeklinde verilir. Burada toplam spin durumları üzerinden de alınır ve $\vec{p}_{fi} = \langle f | \vec{p} | i \rangle = \langle X | \vec{p} | 0 \rangle$ dir. Burada $\langle X |$ ekziton durumlarını, $|0\rangle$ vakum durumunu gösterir. Ekziton soğurma için $|i\rangle$, valans bandında bulunan tüm elektronlar için benzer taban durumdur.

$$\Psi_0 = A \left\{ \Psi_{m_1 \sigma_1}^h(\vec{k}_{t1}, \vec{r}_1), \Psi_{m_2 \sigma_1'}^h(\vec{k}'_{t1}, \vec{r}_2), \dots, \Psi_{m_N \sigma_N'}^h(\vec{k}'_{tN}, \vec{r}_{2N}) \right\} \quad (10.2)$$

Burada A antisimetrizasyon operatörü, Ψ 'ler tek elektron durumları, m_1, \dots, m_N kuantum kuyusundaki kuantize durumlar için valans alt bant indisleri, $\sigma_1, \sigma_1', \dots, \sigma_N'$ spin indislerine karşılık gelir veya blok diagonal valans bandı Hamiltonianının üst/alt bloklarına karşılık gelir [64].

Ekziton durumları aşağıdaki gibi açılabilir.

$$|\Psi_X^{\eta\sigma}\rangle = \sum_{\vec{k}_t} \sum_{n,m} G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}_t) \cdot |n\eta, m\sigma, \vec{k}_t\rangle \quad (10.3)$$

Burada n , m sırasıyla iletkenlik ve valans alt bant indislerini, $|n\eta, m\sigma, \vec{k}_t\rangle = A \left\{ \Psi_{m_1 \sigma_1}^h(\vec{k}_{t1}, \vec{r}_1), \dots, \Psi_{n\eta}^c(\vec{k}_t, \vec{r}), \dots, \Psi_{m_N \sigma_N'}^h(\vec{k}'_{tN}, \vec{r}_N) \right\}$ iletkenlik bandındaki $\Psi_{n\eta}^c(\vec{k}_t, \vec{r})$ dalga fonksiyonlu bir elektronun valans bandındaki $\Psi_{m\sigma}^h$ bir elektronla yer değiştirmesi ile $2N$ elektronlu determinantal durumdur.

Taban durumu için momentum matris elementi sıfırdır.

$$\langle \Psi_0 | \vec{p} | \Psi_0 \rangle = \sum_{m, \sigma, \vec{k}_t} \langle \Psi_{m\sigma}^h(\vec{k}_t, \vec{r}) | \vec{p} | \Psi_{m\sigma}^h(\vec{k}_t, \vec{r}) \rangle = 0 \quad (10.4)$$

Ekziton durumu X ile taban durumu arasındaki momentum matris elementi

$$\langle X | \vec{p} | 0 \rangle = \langle \Psi_X^{\eta\sigma} | \vec{p} | \Psi_0 \rangle = \sum_{n, m, \vec{k}_t} G_{nm}^{\eta\sigma X *}(\vec{k}_t) \cdot \langle \Psi_{n\eta}^c(\vec{k}_t, \vec{r}) | \vec{p} | \Psi_{m\sigma}^h(\vec{k}_t, \vec{r}) \rangle \quad (10.5)$$

ile verilir. Burada iletkenlik ve valans bandının serbest alt bant ketleri, zarf fonksiyonu ve Bloch fonksiyonu parçalarına sahiptir.

$$|\Psi_{n\eta}^C(\vec{k}_t, \vec{r})\rangle = \frac{e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} f_n(z) |U_\eta^C\rangle \quad (10.6)$$

$$|\Psi_{m\sigma}^h(\vec{k}_t, \vec{r})\rangle = \sum_V \frac{e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z) |U_{V\sigma}^h\rangle \quad (10.7)$$

İletkenlik bandında parabolik band yaklaşımımızdan dolayı iletkenlik bandı zarf fonksiyonunda \vec{k}_t bağıllığı görünmez. Ekzitonik çiftlenme durumu için zarf fonksiyonları f_n ve $h_m^{V\sigma}$ sırasıyla iletkenlik bandı etkin kütle eşitliğine ve Luttinger-Kohn eşitliğine uyarlar.

Ekziton zarf fonksiyonu

$$g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho}) = \sum_{n,m,\vec{k}_t} \frac{e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}_t) h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z_h) f_n^\eta(z_e) \quad (10.8)$$

şeklinde yazılır. Aşağıdaki eşitlikler kabul edilerek ekziton zarf fonksiyonu normalize edilir.

$$\sum_n f_n^\eta(z_1) f_n^\eta(z_2) = \delta(z_1 - z_2) \quad (10.9)$$

$$\sum_m h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z_1) h_m^{V'\sigma}(\vec{k}_t, z_2) = \delta_{VV'} \delta(z_1 - z_2) \quad (10.10)$$

$$\sum_V \int d\vec{\rho} \int dz_e \int dz_h |g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho})|^2 = \sum_{n,m,\vec{k}_t} |G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}_t)|^2 = 1 \quad (10.11)$$

Buradaki amaç $G_{nm}^{\eta\sigma X}$ 'i $g_{VX}^{\eta\sigma}$ terimleri cinsinden seriye açmaktır.

$$\begin{aligned} G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}_t) &= \sum_{V'} \int d\vec{\rho} \int dz_e \int dz_h \frac{e^{-i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} h_m^{V'\sigma*}(\vec{k}'_t, z_h) f_n^{\eta*}(z_e) g_{V'X}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho}) \\ &= \sum_{n,m,\vec{k}_t} \sum_{V'} \int dz_e \int dz_h \underbrace{\int d\vec{\rho} \frac{e^{i(\vec{k}_t - \vec{k}'_t)\vec{\rho}}}{A}}_{\delta_{\vec{k}_t, \vec{k}'_t}} G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}_t) h_m^{V'\sigma*}(\vec{k}'_t, z_h) f_n^{\eta*}(z_e) h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z_h) f_n^\eta(z_e) \\ &= \sum_{n,m} G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}'_t) \underbrace{\sum_{V'} \int dz_e f_n^{\eta*}(z_e) f_n^\eta(z_e)}_{\delta_{nn'}} \underbrace{\int dz_h h_m^{V'\sigma*}(\vec{k}'_t, z_h) h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z_h)}_{\delta_{mm'} \delta_{VV'}} \\ &= G_{n'm'}^{\eta\sigma X}(\vec{k}'_t) \text{ olur. Dolayısıyla,} \end{aligned}$$

$$G_{nm}^{\eta\sigma X}(\vec{k}_t) = \sum_V \int d\vec{\rho} \int dz_e \int dz_h \frac{e^{-i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} h_m^{V\sigma*}(\vec{k}_t, z_h) f_n^{\eta*}(z_e) g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho}) \quad (10.12)$$

ispatlanmış olur. Buradan

$$\langle X|\vec{p}|0\rangle =$$

$$\begin{aligned} \sum_{n,m,\vec{k}_t} \sum_V \int d\vec{\rho} \int dz_e \int dz_h \frac{e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z_h) f_n^\eta(z_e) g_{VX}^{\eta\sigma*}(z_e, z_h, \vec{\rho}) \cdot \underbrace{\langle \Psi_{n\eta}^C(\vec{k}_t, \vec{r}) | \vec{p} | \Psi_{m\sigma}^h(\vec{k}_t, \vec{r}) \rangle}_{\sum_{V'} \int dz f_n^{\eta*}(z_e) h_m^{V'\sigma}(\vec{k}_t, z_h) \langle U_\eta^C | \vec{p} | U_{V'\sigma}^h \rangle} \\ (\langle U_\eta^C | U_{V'\sigma}^h \rangle \equiv 0 \text{ kullanıldı}) \end{aligned}$$

$$\langle X|\vec{p}|0\rangle =$$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}_t} \sum_V \int d\vec{\rho} \frac{e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} \int dz \int dz_e \sum_n f_n^{\eta*}(z) f_n^\eta(z_e) \int dz_h \sum_m \sum_{V'} \int dz h_m^{V'\sigma}(\vec{k}_t, z_h) h_m^{V\sigma}(\vec{k}_t, z_h) \times \\ \times \langle U_\eta^C | \vec{p} | U_{V'\sigma}^h \rangle g_{VX}^{\eta\sigma*}(z_e, z_h, \vec{\rho}) \\ \langle X|\vec{p}|0\rangle = \sum_{\vec{k}_t} \sum_V \int dz \int d\vec{\rho} \frac{e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}}}{\sqrt{A}} g_{VX}^{\eta\sigma*}(z_e, z_h, \vec{\rho}) \cdot \langle U_\eta^C | \vec{p} | U_{V\sigma}^h \rangle \quad (10.13) \end{aligned}$$

elde edilir. Burada (10.9) ve (10.10) eşitlikleri kullanılmıştır. Sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ve varyasyonel formalizm ile

$$g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\lambda_V} e^{-\frac{\rho}{\lambda_V}} \cdot S_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h) \equiv g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0) \cdot e^{-\frac{\rho}{\lambda_V}} \quad (10.14)$$

yazılır. Buradan

$$\begin{aligned} \int d^2\rho \cdot g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho}) e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}} = \int_0^\infty d\rho \cdot \rho \cdot e^{-\frac{\rho}{\lambda_V}} \cdot \underbrace{2\pi \cdot J_0(k_t, \rho)}_{\int_0^{2\pi} e^{ik\rho \cos \theta} d\theta} \cdot g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0)^* \\ \int d^2\rho \cdot g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \vec{\rho}) e^{i\vec{k}_t\vec{\rho}} = 2\pi \cdot g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0)^* \frac{1}{\lambda_V (k_t^2 + \lambda_V^{-2})^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

$$\sum_{\vec{k}_t} \rightarrow \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk_t \cdot k_t \int_0^{2\pi} d\varphi$$

yazılır. İlk düzenleme dk_t integrasyonunda

$$\int_0^\infty dk_t \frac{k_t}{\lambda_V (k_t^2 + \lambda_V^{-2})^{\frac{3}{2}}} = 1$$

şeklinde olmalıdır. Buradan

$$\langle X|\bar{p}|0\rangle = \sqrt{A} \sum_V \int dz. g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0)^* \cdot \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \langle U_\eta^c|\bar{p}|U_{V\sigma}^h\rangle \quad (10.15)$$

elde edilir. Bizim durumumuzda φ bağımlılığının olmadığı kabul edildi. Dolayısıyla \hat{e} doğrultusunda polarize edilmiş ışık için

$$f_X^\sigma = \sum_\eta \frac{1}{m_0 E_X} \left| \sum_V \int dz. g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0) \cdot \hat{e} \cdot \langle U_\eta^c|\bar{p}|U_{V\sigma}^h\rangle \right|^2$$

şeklinde osilatör genliğinin tanımlanması (birim alan başına osilatör genliği $\hbar\omega = E_X$ alınarak tanımlanır ve genelde delta fonksiyonunu içermediğinden deneysel olarak soğurma katsayısından daha hassas ölçülmesi olanaklıdır.) ile ekziton soğurma katsayısı

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{n_r c \epsilon_0 m_0 L} \sum_X \sum_\sigma f_X^\sigma \cdot \delta(E_X - \hbar\omega) \quad (10.16)$$

veya açık olarak

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 L \hbar\omega} \sum_X \sum_\sigma \sum_\eta \left| \sum_V \int dz. g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0) \cdot \hat{e} \cdot \langle U_\eta^c|\bar{p}|U_{V\sigma}^h\rangle \right|^2 \cdot \delta(E_X - \hbar\omega)$$

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 L \hbar\omega} \sum_X \sum_\sigma \sum_\eta \left| \sum_V g_V^\eta \cdot \hat{e} \cdot \langle U_\eta^c|\bar{p}|U_{V\sigma}^h\rangle \right|^2 \cdot \delta(E_X - \hbar\omega) \quad (10.17)$$

şeklinde elde edilir. Burada $g_V^\eta = \int dz. g_{VX}^{\eta\sigma}(z_e, z_h, \rho = 0)$ integrali sonlu elemanlar yöntemi ile 9. Bölümde anlatıldığı gibi hesaplandı.

Eğer aşağıdaki nicelikleri tanımlarsak,

$$P = \frac{\hbar}{m_0} \langle iS|p_x|X\rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle iS|p_y|Y\rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle iS|p_z|Z\rangle$$

$$E_P = \frac{2m_0}{\hbar^2} P^2$$

$$\langle iS|p_x|X\rangle = \langle iS|p_y|Y\rangle = \langle iS|p_z|Z\rangle = \sqrt{\frac{E_P \cdot m_0}{2}}$$

ve

$$C \uparrow = |iS \uparrow\rangle$$

$$C \downarrow = |iS \downarrow\rangle$$

$$HH \uparrow = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X+iY) \uparrow\rangle$$

$$LH \uparrow = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle$$

$$LH \downarrow = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X-iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle$$

$$HH \downarrow = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X-iY) \downarrow\rangle$$

$$SO \uparrow = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |Z \uparrow\rangle$$

$$SO \downarrow = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X-iY) \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |Z \downarrow\rangle$$

olduğu hatırlanır ise Tablo 10.1.'deki overlap değerleri elde edilir.

$\langle U_{\eta}^c \vec{p} U_{V\sigma}^h \rangle$	$HH \uparrow$	$LH \uparrow$	$LH \downarrow$	$HH \downarrow$	$SO \uparrow$	$SO \downarrow$
$C \uparrow$	$-\frac{\sqrt{E_p m_0}}{2} (\hat{x} + i\hat{y})$	$\sqrt{\frac{E_p m_0}{3}} \hat{z}$	$\sqrt{\frac{E_p m_0}{12}} (\hat{x} - i\hat{y})$	0	$\sqrt{\frac{E_p m_0}{6}} \hat{z}$	$\sqrt{\frac{E_p m_0}{6}} (\hat{x} - i\hat{y})$
$C \downarrow$	0	$-\sqrt{\frac{E_p m_0}{12}} (\hat{x} + i\hat{y})$	$\sqrt{\frac{E_p m_0}{3}} \hat{z}$	$\frac{\sqrt{E_p m_0}}{2} (\hat{x} - i\hat{y})$	$\sqrt{\frac{E_p m_0}{6}} (\hat{x} + i\hat{y})$	$-\sqrt{\frac{E_p m_0}{6}} \hat{z}$

Tablo 10.1. İletkenlik ve valans bandı Bloch fonksiyonlarının overlabi

TE polarize ışık için ekziton soğurma katsayısı hesaplanırken ışığın polarizasyonu üzerinden ortalama alınmalıdır, yoksa soğurma katsayısı elektrik alanın düzlemdeki doğrultusuna bağlı olur. Soğurma katsayısı hesaplamalarında valans bandının 4x4 Luttinger-Kohn eşitliğine uyduğu varsayılmıştır. Bundan dolayı ekziton zarf fonksiyonu dört katlı dejenerasyona sahiptir. Buna göre ekziton zarf fonksiyonu $HH \uparrow = \varphi_1$, $LH \uparrow = \varphi_2$, $LH \downarrow = \varphi_3$, $HH \downarrow = \varphi_4$ parçalarına sahiptir. Ayrıca, E_g yasak

enerji aralığı, E_e elektronun alt bant enerjisi, E_h boşluğun alt bant enerjisi ve E_B ekziton bağlanma enerjisi olmak üzere

$$E_X = E_g + E_e - E_h - E_B$$

$$\delta(E_X - \hbar\omega) \rightarrow \frac{\Gamma/2\pi}{(\hbar\omega - E_X)^2 + (\Gamma/2)^2} \text{ (Lorentzian fonksiyon)}$$

dır. Sonuçta, ekziton soğurma katsayısı sırasıyla,

$$\text{TE durumu için; } \hat{e} = \hat{\rho} = \cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y} \quad \Rightarrow \quad \hat{e} \cdot (\hat{x} \pm i\hat{y}) = e^{\pm i\theta}$$

$$\alpha^{TE}(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 L \hbar \omega} \sum_X 2 \cdot \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \left| \mathcal{G}_1 \left(-\frac{\sqrt{E_P m_0}}{2} e^{+i\theta} \right) + \mathcal{G}_3 \left(\sqrt{\frac{E_P m_0}{12}} e^{-i\theta} \right) \right|^2 \cdot \delta(E_X - \hbar\omega)$$

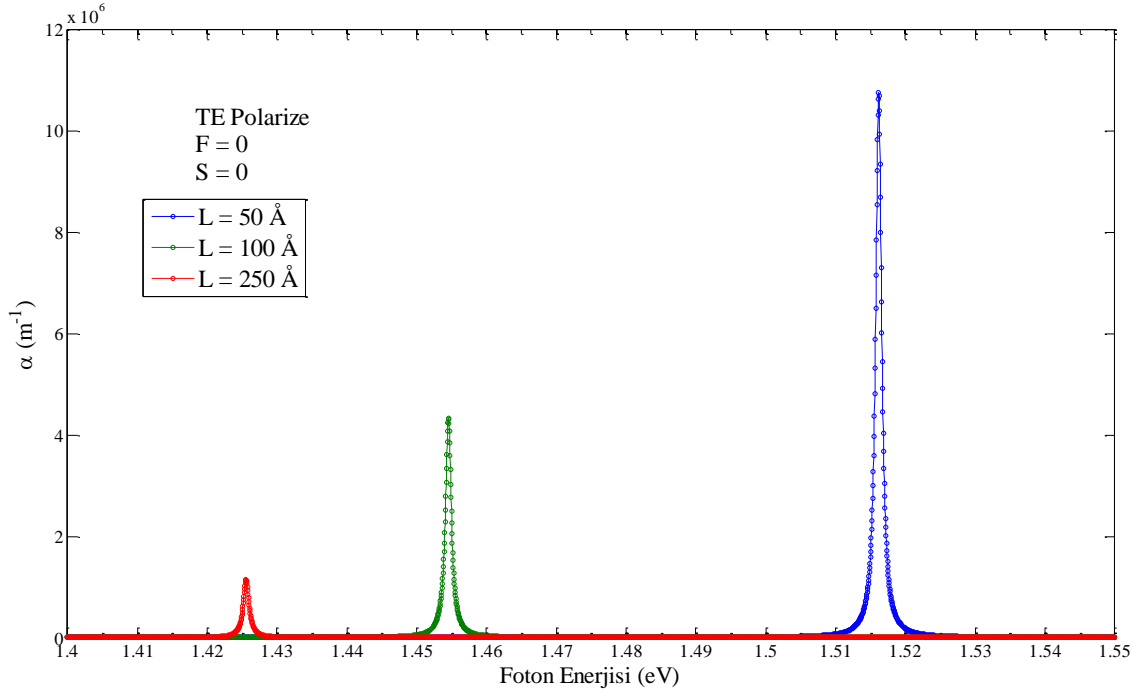
$$\alpha^{TE}(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar E_P}{n_r c \epsilon_0 m_0 2 L \hbar \omega} \sum_X \left(|\mathcal{G}_1|^2 + \frac{|\mathcal{G}_3|^2}{3} \right) \cdot \delta(E_X - \hbar\omega) \quad (10.18)$$

$$\text{TM durumu için; } \hat{e} = \hat{z} \quad \Rightarrow \quad \hat{e} \cdot \hat{z} = 1$$

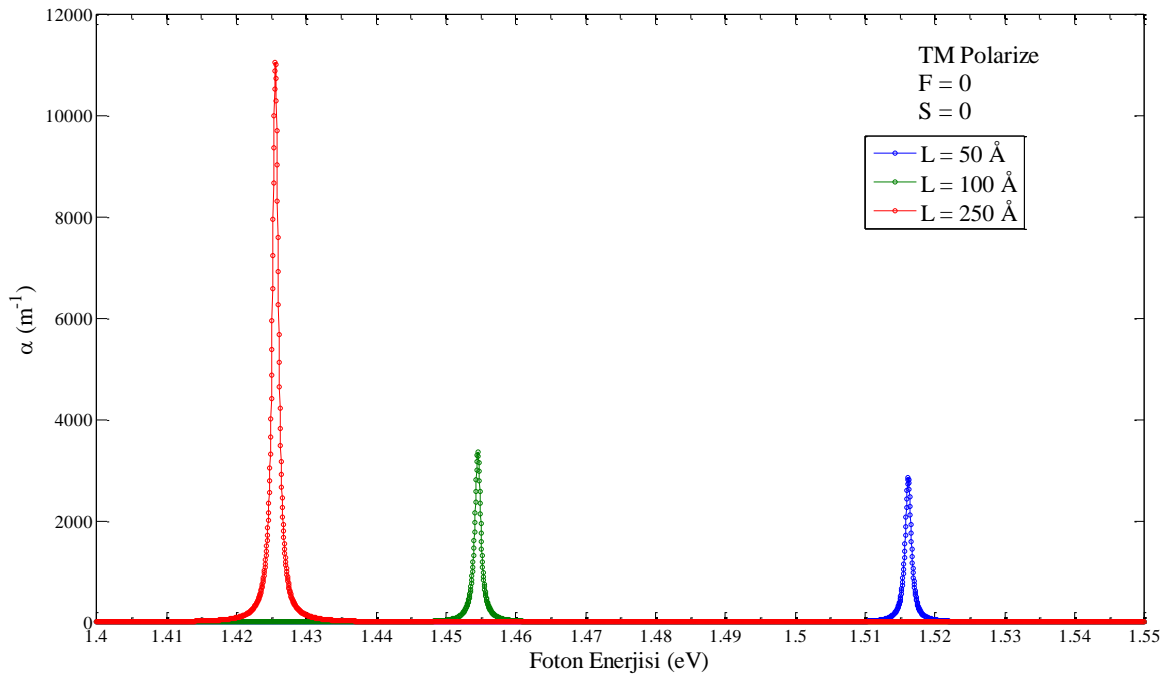
$$\alpha^{TM}(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 L \hbar \omega} \sum_X 2 \cdot \left| \mathcal{G}_2 \sqrt{\frac{E_P m_0}{3}} \right|^2 \cdot \delta(E_X - \hbar\omega)$$

$$\alpha^{TM}(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar 2 E_P}{n_r c \epsilon_0 m_0 3 L \hbar \omega} \sum_X |\mathcal{G}_2|^2 \cdot \delta(E_X - \hbar\omega) \quad (10.19)$$

denklemleri ile verilir. Yukarıdaki denklemlerde bir önceki bölümde bulunan ekziton zarf fonksiyonları ve bağlanma enerjileri kullanılarak $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusunda ekziton soğurma katsayısının $+z$ doğrultusunda uygulanan elektrik alana, beş farklı doğrultuda uygulanan baskıya ve kuantum kuyusunun genişliğine bağlılığı incelendi.



Şekil 10.1. (a) *GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TE polarize olması durumu için A-Ekziton soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi



Şekil 10.1. (b) *GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As* tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TM polarize olması durumu için A-Ekziton soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi

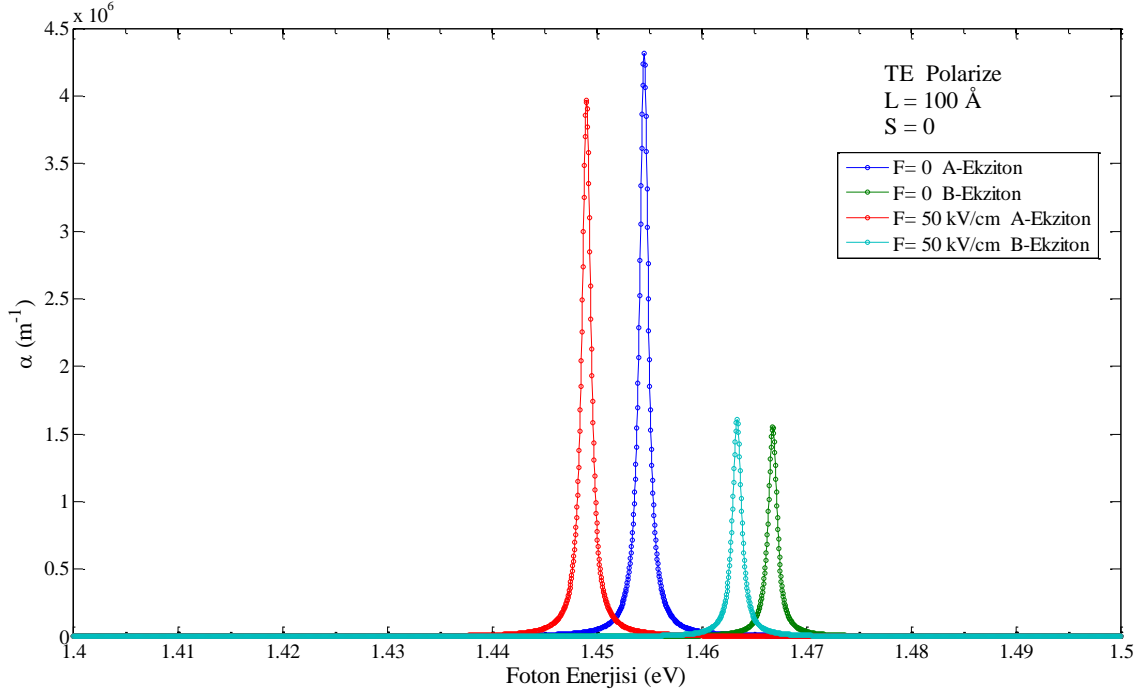
Şekil 10.1.'de $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda A-Ekziton soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için gösterilmiştir. Şekil 10.1.(a)'ya bakıldığında, kuyu genişliğinin azalması ile ekziton soğurma pikinin maksimum değerinin daha büyük foton enerjilerine doğru kaydığı ve bu kayma sırasında soğurma pikinin genliğinin de arttığı görülmektedir. TM polarize ışık durumunda ise, soğurma piki pozisyonlarının değişmediği ve pik genliklerinin çok küçüldüğü görülmektedir. Bunun nedeni, ekziton dalga fonksiyonunun LH bileşeninin (ϕ_2) çok küçük olmasıdır. TM polarize durumunda soğurma katsayısı ekziton dalga fonksiyonunun sadece ϕ_2 bileşenine bağlıdır.

Şekil 10.2.'de elektrik alan altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda A-Ekziton ve B-Ekzitonun soğurma katsayılarının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için gösterilmiştir. Şekil 10.2. (a)'da A ekzitonunun soğurma piki genliğinin B ekzitonundan daha büyük olduğu ve pik pozisyonu enerjisinin daha küçük olduğu görülmektedir. A ekzitonunun enerjisi B ekzitonunun enerjisinden daha küçük olduğu için pik pozisyonu enerjisi de küçüktür. Ayrıca TE polarize durum için A ekzitonunun pik genliğinin B ekzitonunun yaklaşık üç katı olduğu görülmektedir. Dolayısıyla, TE polarize durum için A ekzitonunun soğurma spektrumunda baskın olduğu söylenebilir. Şekil 10.2. (a)'da dikkat edilecek diğer bir nokta ise, elektrik alanın uygulanması ile A ekzitonunun pik genliği ve maksimum pik pozisyonunun enerjisi azalırken, B ekzitonunun sadece pik pozisyonunun enerjisi azalmaktadır. Elektrik alanın uygulanması ile B ekzitonunun pik genliği artmaktadır. Elektrik alanın uygulanmasıyla pik pozisyonu enerjisinin azalmasının nedeni, QCSE (Kuantum kuşatma Stark etkisi) ile açıklanabilir [39, 49, 65, 66]. Elektrik alanın uygulanması ile elektronlar alana zıt yönde, boşluklar da alan ile aynı yönde sürüklenirler ve bundan dolayı elektron ve boşluk dalga fonksiyonları arasındaki overlapın azalması ekziton pik genliğinin de azalmasına neden olur. TM polarize durumunda ise (Şekil 10.2. (b)), B ekzitonunun soğurma spektrumunda baskın olduğu görülmektedir. Bunun nedeni, TM polarize durumda soğurma katsayısının ekziton dalga fonksiyonunun LH bileşenine bağlı olmasında yatmaktadır. B ekzitonu, LH bileşeninin daha baskın olduğu ekzitondur ve bundan dolayı da TM polarize durumda soğurma spektrumunda baskın olmaktadır. A

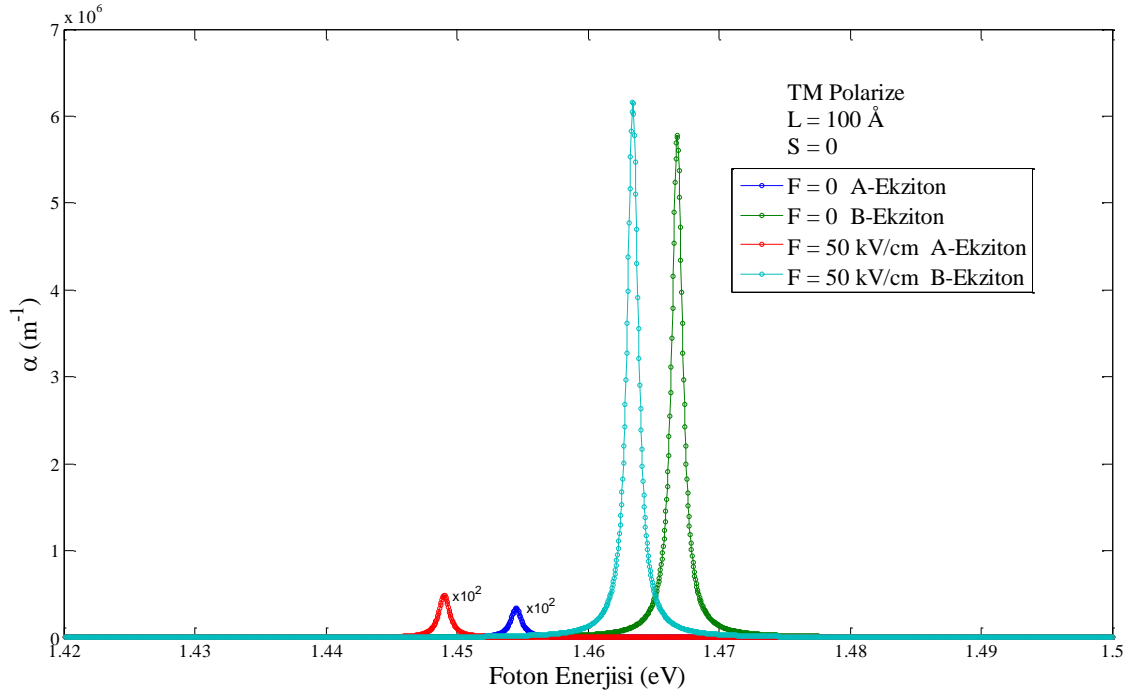
ekzitonu LH bileşenini çok az içerdiğinden TM durumunda soğurma pikinin genliği B ekzitonuna göre çok küçüktür.

Şekil 10.3.'te $S||[100]$ boyunca uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için verilmiştir. Şekil 10.2.(a)'ya bakıldığında, $S = 0$ durumunda ekziton soğurma pikinin genliğinin daha büyük olduğu görülmektedir. Ayrıca pozitif baskı durumunda ekziton soğurma piki pozisyonunun enerjisi $S = 0$ durumundaki foton enerjisi değerinden daha küçük foton enerjisi değerine kayarken, negatif baskı durumunda ise daha büyük foton enerjisi değerine kaymaktadır. Bu davranışın temel iki nedeni vardır. Bunlardan birincisi, baskının pozitif olması durumunda oluşan ilk ekziton B ekzitonu iken, negatif baskı durumunda ise oluşan ilk ekzitonun A ekzitonu olmasıdır. İkincisi ise, negatif baskı durumunda iletkenlik alt bandı enerjisi ve valans bandının ilk alt bandının enerjisi artarak efektif bant aralığını arttırması, pozitif baskı durumunda iletkenlik alt bandı enerjisinin azalması ve valans alt bant enerjisinin artmasıyla efektif bant aralığının azalmasıdır. $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için $S = 20 \text{ kbar}$ 'lık baskı durumunda kayma miktarı $\sim 115 \text{ meV}$ iken, $S = -20 \text{ kbar}$ 'lık durumda ise $\sim 25 \text{ meV}$ 'dir.

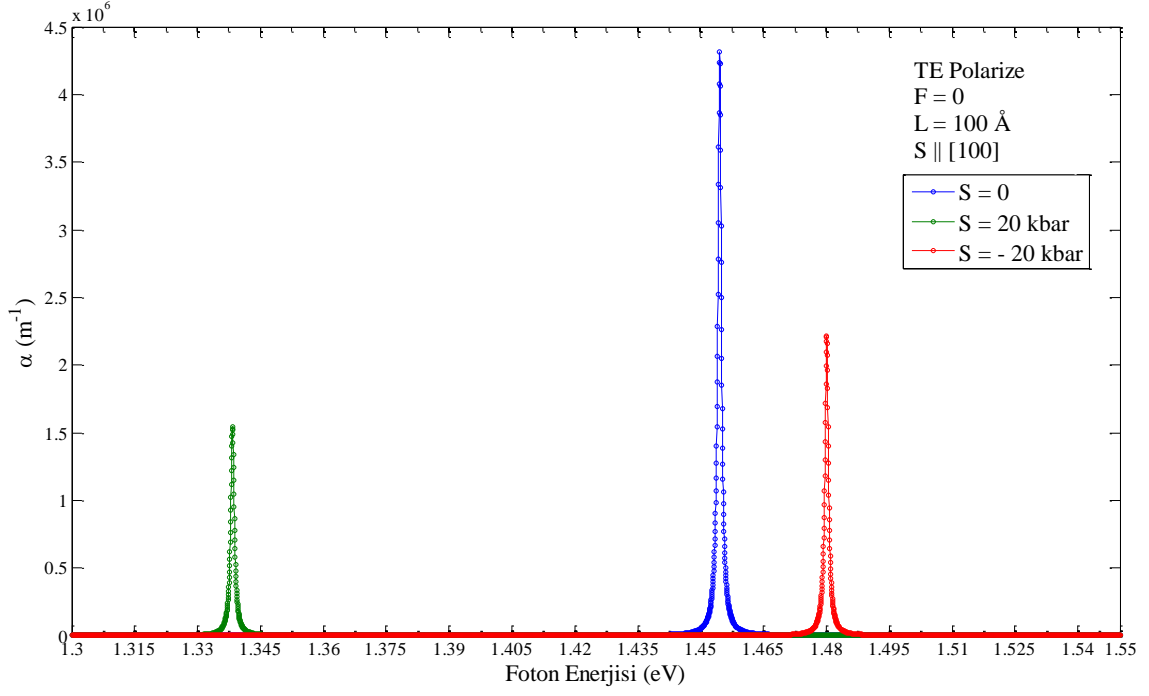
Şekil 10.3. (b) incelendiğinde, ekziton soğurma pik pozisyonu enerjilerinin TE durumundaki ile aynı olduğu görülmektedir. Ayrıca $S = 0$ ve $S = -20 \text{ kbar}$ durumundaki pik genliklerinin azaldığı, $S = 20 \text{ kbar}$ durumundaki pik genliğinin ise ~ 2.5 kat arttığı görülmektedir. bunun sebebi, TM durumunda soğurma katsayısının ekziton zarf fonksiyonunun sadece LH bileşenine bağlı olmasıdır. Bu nedenden dolayı da $S = 0$ durumundaki pik genliği, $S = -20 \text{ kbar}$ durumundakinden daha küçüktür. $S = 0$ durumundaki soğurma piki, diğer piklerle birlikte gösterebilmek için 10^2 çarpanı ile çarpılarak büyütülmüştür.



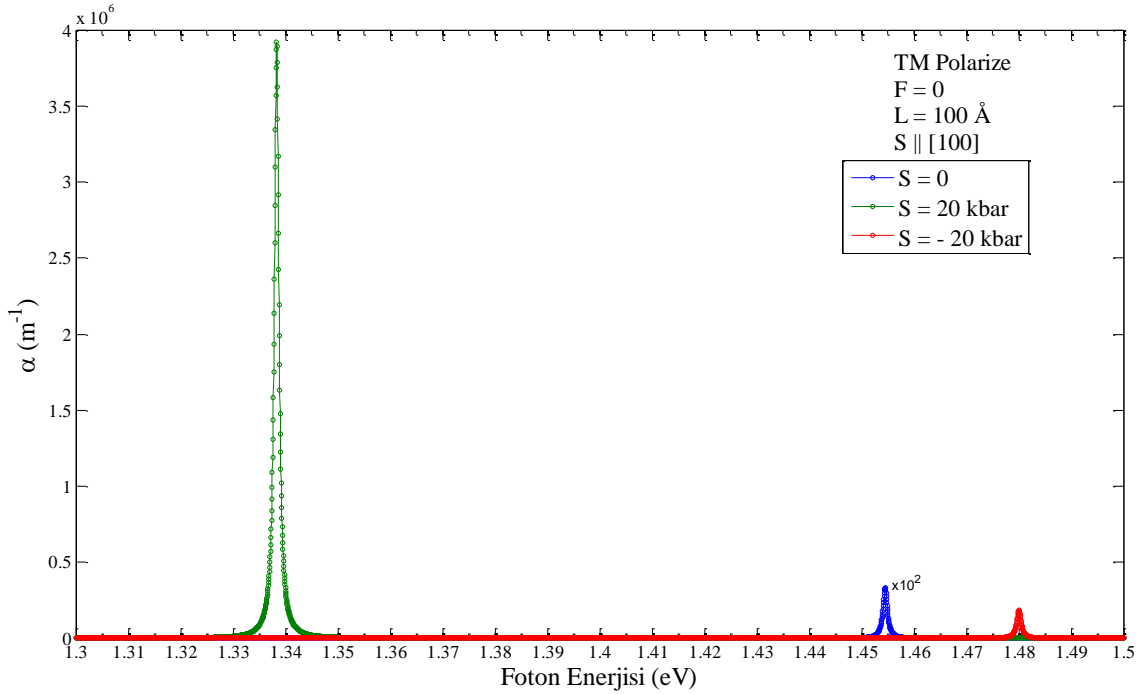
Şekil 10.2. (a) $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TE polarize durumu için alan altında A ve B-Ekzitonun soğurma katsayılarının foton enerjisine göre değişimi



Şekil 10.2. (b) $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda gelen ışığın TM polarize durumu için alan altında A ve B-Ekzitonun soğurma katsayılarının foton enerjisine göre değişimi



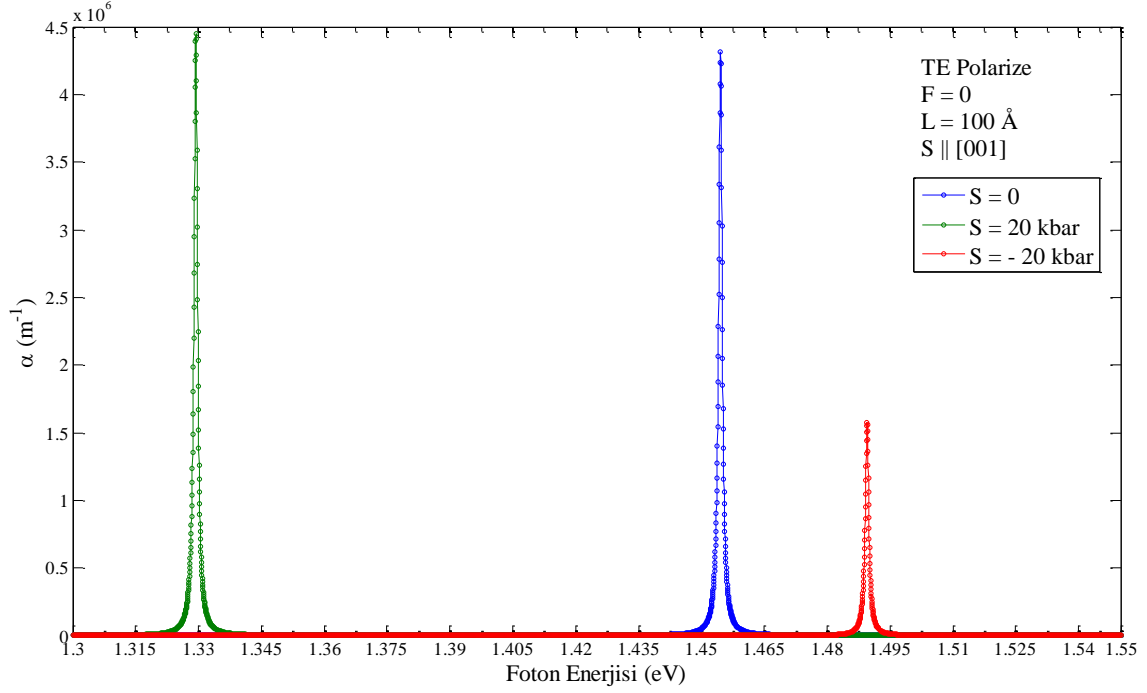
Şekil 10.3. (a) $S||[100]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ Å}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)



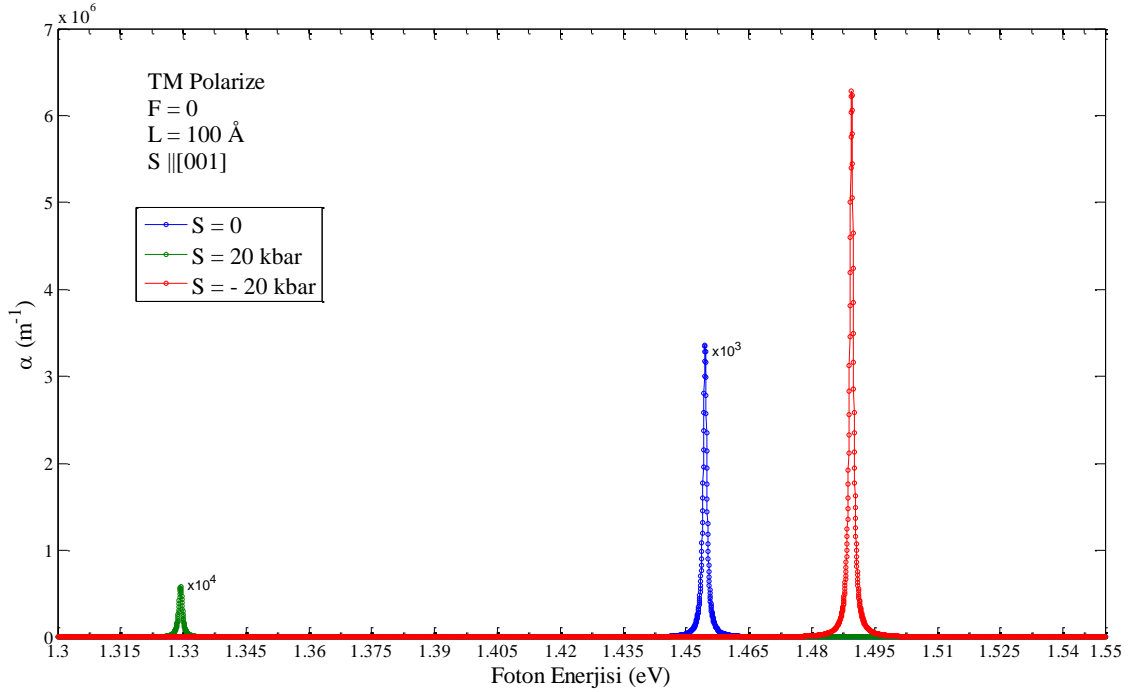
Şekil 10.3. (b) $S||[100]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ Å}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)

Şekil 10.4.'te $S||[001]$ boyunca uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için verilmiştir. TE polarize durumunda, $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliğinin, $S = 0$ ve $S = -20 \text{ kbar}$ için olandan daha büyük olduğu görülmektedir. Ayrıca $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma piki pozisyonu enerjisinde $S = 0$ durumuna göre $\sim 125 \text{ meV}$ 'lik kayma meydana gelmiştir. $S = -20 \text{ kbar}$ için ise, $S = 0$ durumuna göre $\sim 35 \text{ meV}$ 'lik bir kayma meydana gelmiştir. Baskı ile foton enerjisindeki kaymanın nedeni bir önceki durumla aynıdır. Buradaki baskının doğrultusu değiştiğinden önceki baskı türünden farklı büyüklükte bir kayma meydana gelmiştir. Ekziton dalga fonksiyonunun bileşenlerinin farklı oranlarda olmasından dolayı bu durumdaki pik genlikleri değişmiştir. Örneğin, $S = 20 \text{ kbar}$ durumundaki ekziton dalga fonksiyonu $S = -20 \text{ kbar}$ durumundakinden daha büyük oranda HH bileşenine sahiptir. $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı altında en düşük enerjili ekziton A ekzitonu iken, negatif baskı durumunda ise B ekzitonudur.

Şekil 10.4. (b)'ye bakıldığında, TE durumundaki ekziton pik pozisyonu enerjilerinin değişmediği ve $S = -20 \text{ kbar}$ için ekziton soğurmanın başat olduğu görülmektedir. Ayrıca $S = -20 \text{ kbar}$ için elde edilen soğurma pikinin, TE durumundaki piklerin genliğinden daha büyük genlikli bir pike ($\sim 6.5 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$) sahip olduğu görülmektedir. Bunun nedeni $S = -20 \text{ kbar}$ için ekziton dalga fonksiyonunun LH bileşeninin oranının daha büyük olmasıdır. Yine burada $S = 0$ ve $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma grafikleri farklı çarpanlarla çarpılarak aynı şekil üstünde gösterilmiştir.



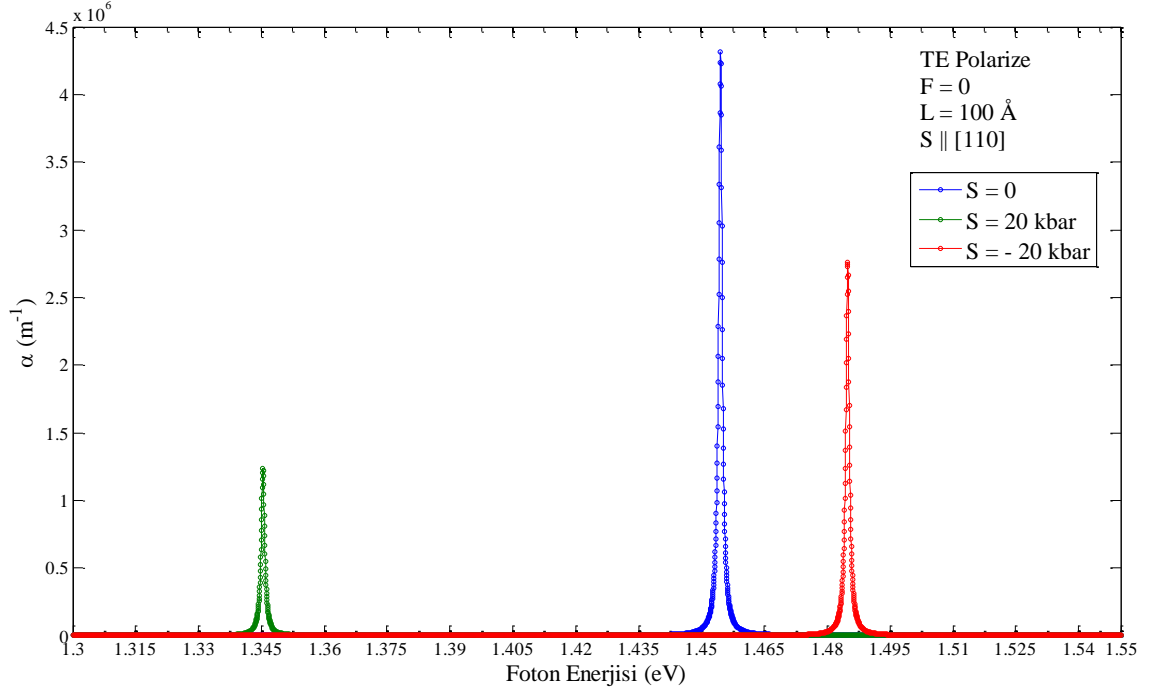
Şekil 10.4. (a) $S \parallel [001]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)



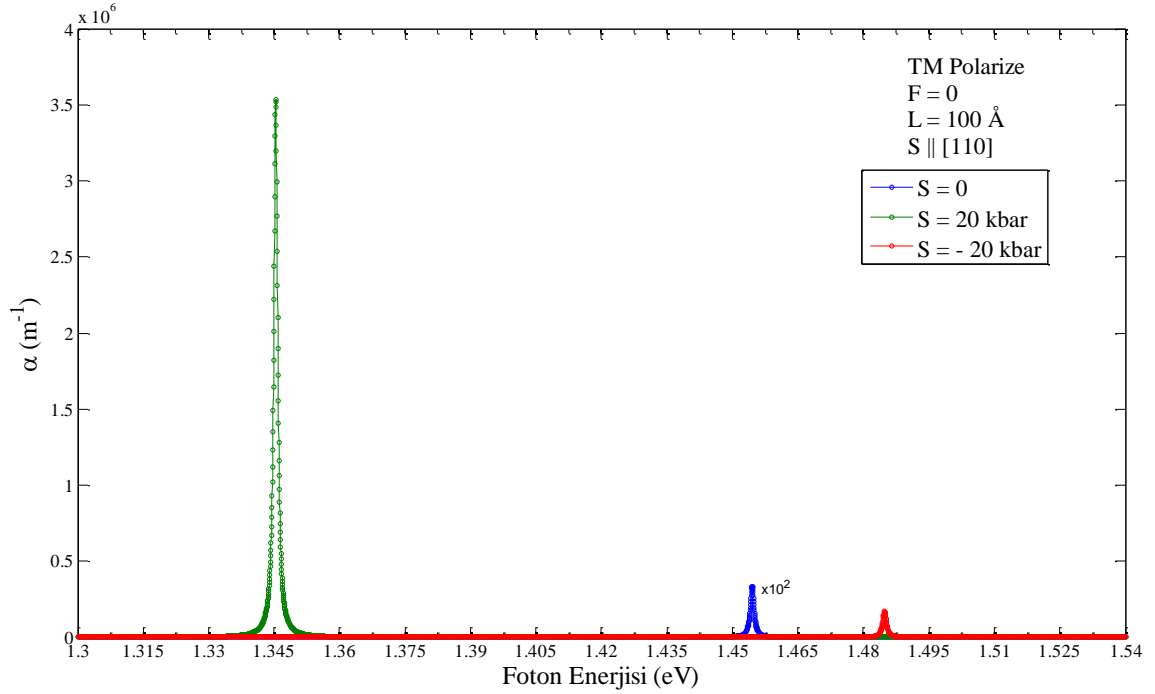
Şekil 10.4. (b) $S \parallel [001]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)

Şekil 10.5.'te $S||[110]$ boyunca uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için verilmiştir. Bu şekle bakıldığında, negatif baskı durumunda $S = 0$ durumuna göre soğurma pikinin daha büyük foton enerjisi değerlerine kayarak genliğinin azaldığı, pozitif baskı durumunda ise pikin daha küçük foton enerjisi değerlerine kayarak genliğinin azaldığı görülmektedir. $S||[110]$ boyunca uygulanan baskı ve TE polarize durum için, $S = 20 \text{ kbar}$ 'lık baskı uygulandığında soğurma pik pozisyonu enerjisi $S = 0$ durumuna göre $\sim 110 \text{ meV}$ kaymaktadır. $S = -20 \text{ kbar}$ 'lık baskı uygulandığında ise $S = 0$ durumuna göre $\sim 30 \text{ meV}$ kaymaktadır. Şekil 10.5.(b)'ye bakıldığında, TE durumundaki pik pozisyonu enerjilerinin değişmediği ve $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin en büyük olduğu görülmektedir. Bunun sebebi, $S||[110]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı altında en düşük enerjili ekzitonun B ekzitonu ve negatif baskı altında da A ekzitonu olmasıdır. Burada da yine görülebilmesi için $S = 0$ durumundaki soğurma grafiği 10^2 çarpanı ile çarpılmıştır.

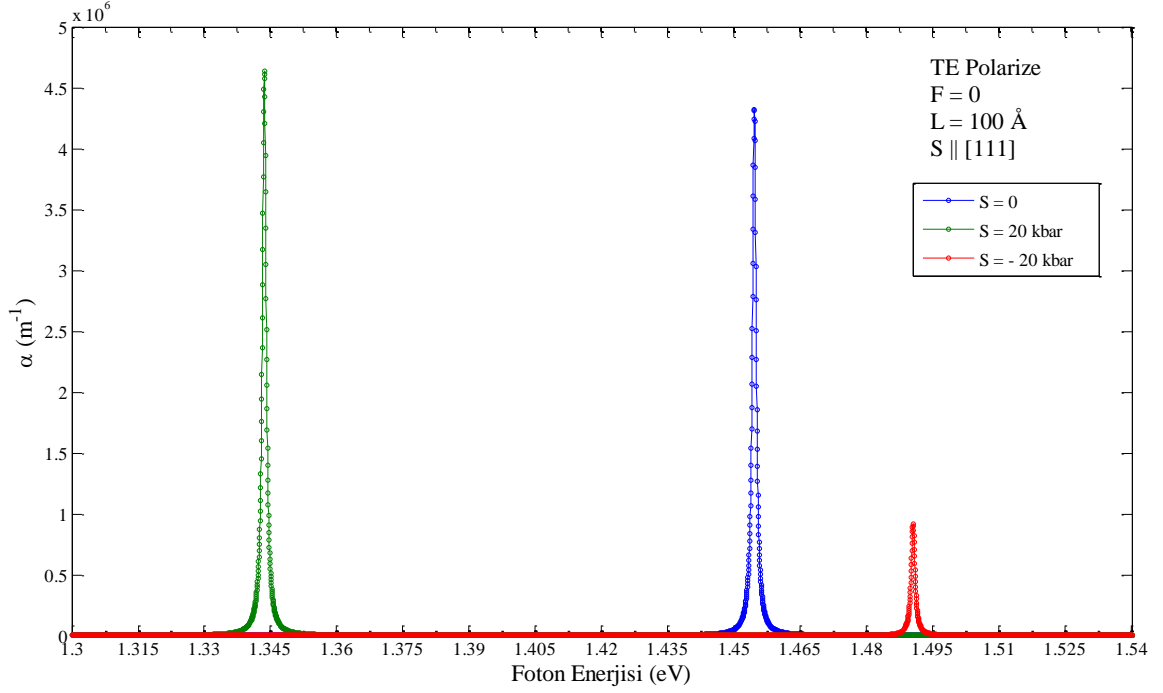
Şekil 10.6.'da $S||[111]$ boyunca uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için verilmiştir. Bu baskı doğrultusu altında ve TE polarize durumda (Şekil 10.6.(a)), ekziton soğurma pik pozisyonu enerjileri $S||[110]$ doğrultusu için bulunanlara yaklaşık olarak eşittir. Fakat soğurma pik genlikleri farklıdır. Bunun nedeni ise, $S||[111]$ doğrultusunda uygulanan pozitif ve negatif baskı altında en düşük enerjili ekzitonun A ekzitonu olmasıdır. Şekil 10.6.(b)'den ekziton soğurma pik enerjilerinin TE durumundaki ile aynı olduğu görülmektedir. Burada ayrıca $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin daha büyük olduğu görülmektedir. Bunun nedeni, $S = 20 \text{ kbar}$ için ekziton dalga fonksiyonunun LH bileşeninin oranının diğerlerinden daha büyük olmasıdır. Burada da yine görülebilmesi için $S = 0$ durumundaki soğurma grafiği 10^2 çarpanı ile çarpılmıştır.



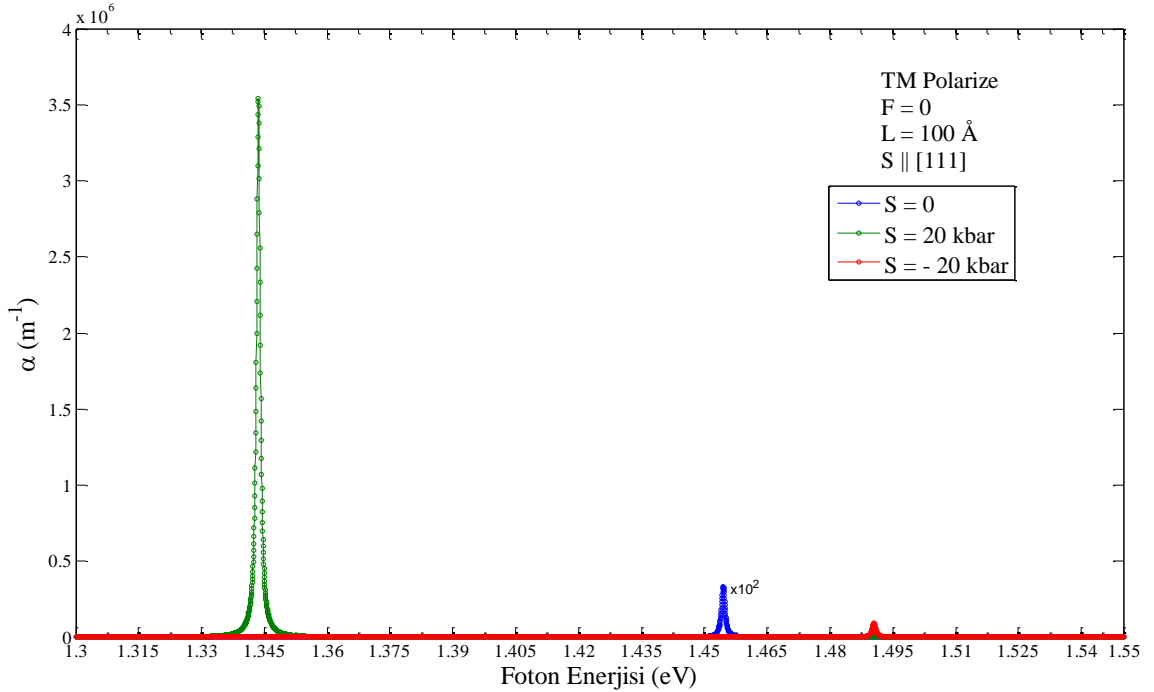
Şekil 10.5. (a) $S \parallel [110]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)



Şekil 10.5. (b) $S \parallel [110]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)

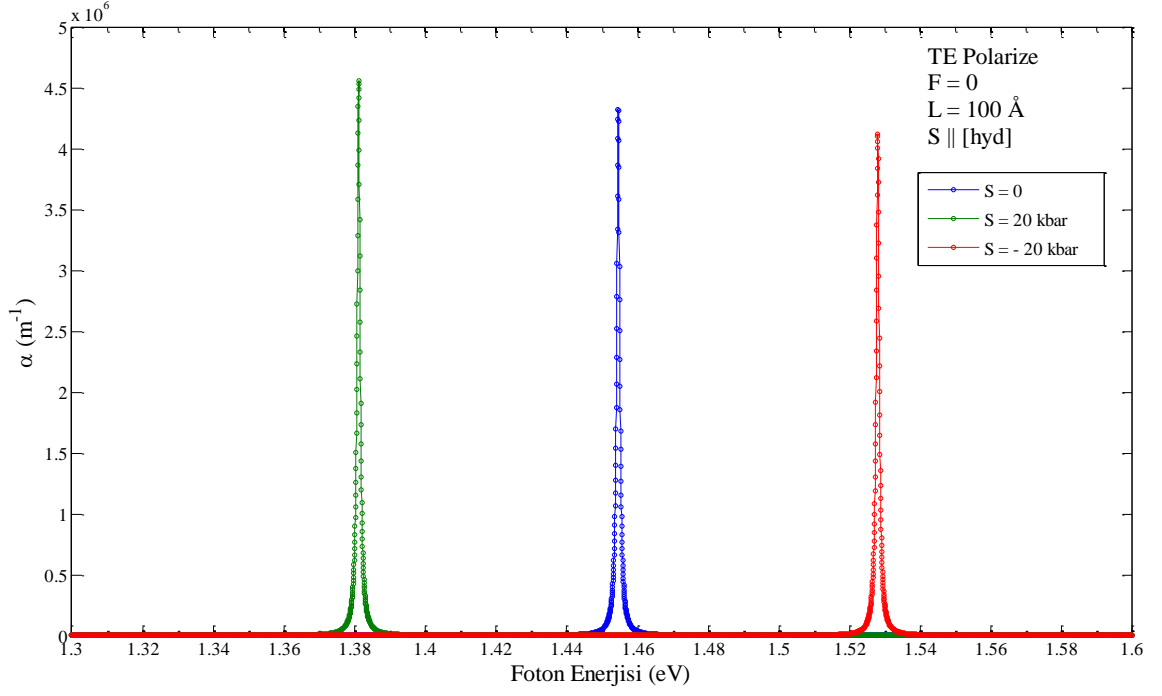


Şekil 10.6. (a) $S||[111]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)

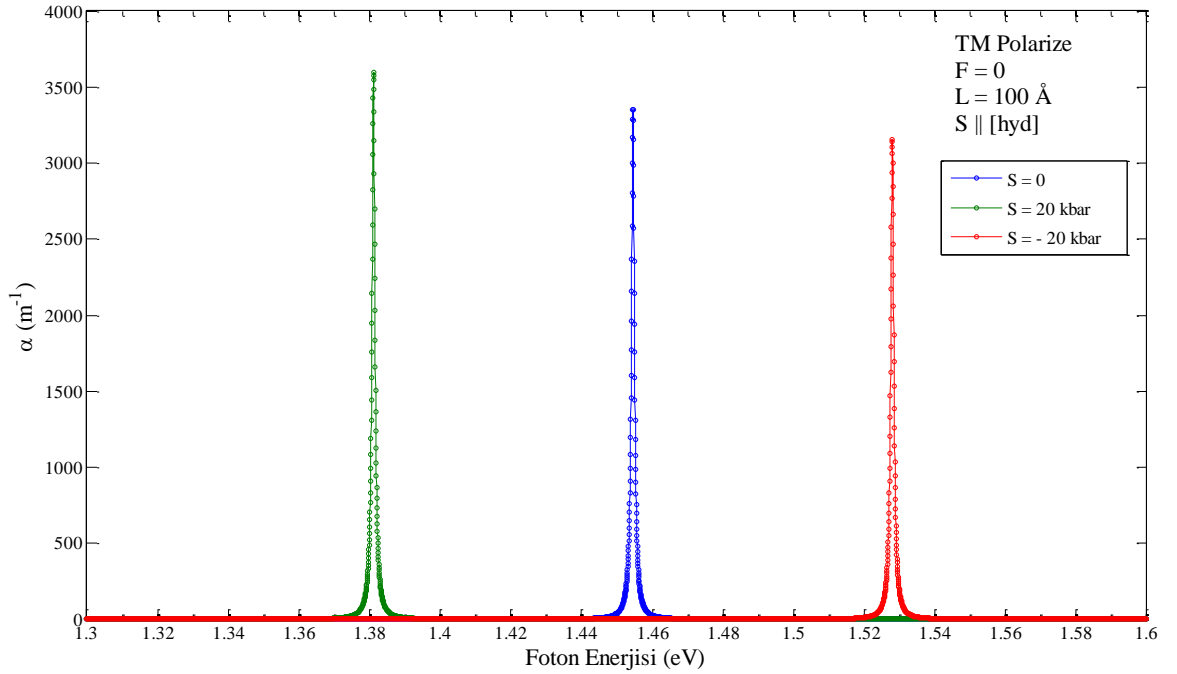


Şekil 10.6. (b) $S||[111]$ boyunca uygulanan baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)

Şekil 10.7.'de hidrostatik baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi (a) Gelen ışığın TE polarize olması durumu için, (b) Gelen ışığın TM polarize olması durumu için verilmiştir. Pozitif ve negatif hidrostatik baskı altında en düşük enerjili ekziton A ekzitonudur. Bu yüzden TE durumunda soğurma piklerinin genlikleri TM durumundakinden büyük çıkmıştır. Şekil 10.7.(a)'ya bakıldığında, pozitif ve negatif baskı altında soğurma pikinin $S = 0$ durumuna göre aynı miktarda kaymaya uğradığı görülmektedir. Kayma miktarı 20 kbar 'lık baskı için $\sim 74 \text{ meV}$ 'dir. Soğurma piki genlikleri arasında çok az bir fark vardır. Şekil 10.7.(b)'de pik pozisyonu enerjilerinin değişmediği ve soğurma pik genliklerinin çok küçüldüğü (10^3 kat) görülmektedir. Hidrostatik baskı altında en düşük enerjili ekzitonun dalga fonksiyonunda LH bileşeninin oranı çok küçüktür. Dolayısıyla, TM durumunda ekziton pik genlikleri çok küçülmüştür.



Şekil 10.7. (a) Hidrostatik baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TE polarize olması durumu)



Şekil 10.7. (b) Hidrostatik baskı altında $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusundaki ilk ekzitonun soğurma katsayısının foton enerjisine göre değişimi ($L = 100 \text{ \AA}$ ve gelen ışığın TM polarize olması durumu)

11. SONUÇLAR

Bu çalışmada $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyu sisteminin elektronik bant yapısı ve optik özelliklerinin elektrik alana ve beş farklı doğrultuda uygulanan baskıya bağlı değişimi, çoklu bant etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde (\mathbf{k}, \mathbf{p} teorisi) sonlu elemanlar yöntemi ile incelenmiştir. Sonlu elemanlar yöntemi ile yapılan elektronik bant yapısı hesaplamalarında global elementteki nod sayısı 4, toplam nod sayısı da 4000 olarak alındı. Bu enerji öz değeri hesaplamalarında çok küçük hata miktarlarına ($\sim 0.001 \text{ meV}$) karşılık gelmektedir.

7. bölümde $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun iletkenlik bandındaki bir elektronun dalga fonksiyonu, alt bant enerji değerleri ile bant içi soğurma katsayısının elektrik alan ve baskı altındaki değişimleri incelendi. Uygulanan baskının pozitif veya negatif olmasına bağlı olarak tüm alt bantların enerjileri ve kuyu potansiyeli değeri enerji ekseninde aşağıya veya yukarıya doğru eşit miktarda kaymaktadır. Ayrıca iletkenlik bandı taban durumu enerjisi elektrik alanın artmasıyla azalırken, birinci uyarılmış durumun enerjisi elektrik alanın artmasıyla neredeyse değişmemektedir. Elektrik alanının artmasıyla birlikte bant içi soğurma pikinin enerjisi ve genliği artmaktadır. $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma piki $F = 0$ 'da 31 meV pozisyonunda ve $505\,554 \text{ m}^{-1}$ büyüklüğünde bir genliğe sahip iken, $F = 100 \text{ kV/cm}$ 'de ise 68 meV 'de ve $2\,269\,140 \text{ m}^{-1}$ büyüklüğünde bir genliğe sahiptir. Dolayısıyla bu değerlere bakıldığında elektrik alanın 100 kV/cm 'ye arttırılması ile 37 meV 'lik kayma ve soğurma pikinde yaklaşık 4.5 kat artış görülmektedir. Ekziton soğurma ile bant içi soğurma karşılaştırıldığında bu sonuçlar iki farklı özellik olarak ortaya konulabilir [2]. Soğurma pikinin enerjisinin artarak enerji ekseninde kayması kuantum kuşatma Stark etkisi diye bilinir. Bunun nedeni elektrik alanın artmasıyla ilk ve ikinci alt bant arasındaki enerji farkının artmasıdır. Ayrıca bant içi geçişlerde elektrik alan arttıkça soğurma pikinin genliğinin artmasının sebebi; elektrik alanın tüm durumlar için elektronları kuyunun aynı tarafına itmesi dolayısıyla alt bantlar arasındaki overlapi arttırmasıdır. Kuantum kuyusuna uygulanan baskının soğurma pikinin enerjisini değiştirmeden sadece genliğini değiştirdiği görülmüştür. $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda 1-2 geçişine ait bant içi soğurma katsayısının $F = 0$ durumunda $S = 20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği $4\,021\,470 \text{ m}^{-1}$ iken, $S = -20 \text{ kbar}$ için soğurma pikinin genliği $78\,520.6 \text{ m}^{-1}$ 'dir. Baskının uygulanmasıyla alt bantlar arasındaki enerji farkının sabit

kalmasından dolayı soğurma pikinin enerjisi değişmemektedir. Baskının yanında elektrik alanın da uygulanmasıyla soğurma pikinin genliği daha da artmaktadır. Aynı zamanda pikin enerjisi de artar. Bu bölümde elde edilen diğer bir sonuç ise, $F = 0$ durumunda yasaklı olan 1-3 geçişinin elektrik alanın uygulanıp paritenin değişmesi ile artık izinli olmasıdır. Bu sonuçlara bakarak bant içi geçişlerde uygulanan baskı, elektrik alan ve kuyu genişliği birer ayar parametresidir denilebilir.

Bölüm 8’de, külçe III-V bileşikleri için elde edilen 4×4 ve 6×6 ’lık Luttinger-Kohn Hamiltonianını kullanarak GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As kuantum kuyularında valans band yapısı çoklu band etkin kütle yaklaşımı (**k.p** yöntemi) ve sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile hesaplandı. Bu yöntemin geçerliliğini kontrol etmek için sonuçlarımızı, varyasyonel metodla elektrik alan altında spin orbit çiftleniminin valans bandı üzerindeki etkisini inceleyen Sanders ve Bajaj [38]’in sonuçları ve de valans band yapısını sonlu farklar metodunu (Finite Difference Method) kullanıp 4×4 ’lük Luttinger-Kohn Hamiltonianını uniter dönüşüm yaparak eksen yaklaşımı ile çözen Ahn ve Chuang [41]’in sonuçlarıyla karşılaştırdık. Bu karşılaştırma neticesinde, sonuçlarımızın onların bulduğu sonuçlarla uyumlu olduğunu gördük. Daha sonra sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile valans bandındaki dejenere alt bantların k_t ’ye göre değişimi üzerinde spin-orbit çiftleniminin, elektrik alanın, beş farklı doğrultuda uygulanan baskının ve kuyu boyutlarının etkisi araştırıldı. $k_t = 0$ ’daki karakterlere göre alt bantlar “ağır boşluk” (HH), “hafif boşluk” (LH) ve “spin orbit boşluk” bandı şeklinde adlandırılabilir, fakat $k_t \neq 0$ ’da herhangi bir enerji düzeyine sadece HH (veya LH veya SO) bandı denilemez. Çünkü, k_t değiştikçe her karakterden farklı oranda katkı gelmektedir ve bu oranlara bakılarak o k_t değerinde alt bant enerjisinin ağırlıklı olarak hangi karakteri taşıdığı söylenebilir. Bu yüzden biz alt bantlarımızı $k_t = 0$ ’daki ağırlıklı karakterine göre A, B ve C sınıfı bant şeklinde isimlendirdik. Buna göre; ilgili alt bant $k_t = 0$ ’da HH ağırlıklı ise sırasıyla A1, A2, A3,.. şeklinde; alt bant $k_t = 0$ ’da LH ağırlıklı ise sırasıyla B1, B2, B3,.. şeklinde; alt bant $k_t = 0$ ’da SO ağırlıklı ise sırasıyla C1, C2, C3,.. şeklinde adlandırdık. Sonlu k_t değerlerinde ($k_t \neq 0$) tüm alt bantlar spin orbit çiftleniminden etkilenirler. $k_t \neq 0$ değerlerinde spin orbit etkileşmesi içeren (sürekli çizgiler) bütün alt bantların enerjileri spin orbit etkileşmesi içermeyen (kesikli çizgiler) alt bantların enerjilerinden büyüktür. Bu genel davranış rastlantı değildir. Çünkü, kuantum mekaniksel düzey itmesinin (quantum-mechanical level repulsion) direkt bir sonucudur [38]. Bu yüzden, altta bulunan alt bant enerjilerinin yukarıda

bulunan alt bant enerjilerine göre daha fazla spin orbit çiftleniminden etkilendiği görülmektedir. 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. Bütün k_t değerlerinde elektrik alanı yok iken, 4×4 'lük ve 6×6 'lık Hamiltonianlar iki katlı dejenere enerji düzeyleri verirken elektrik alanı uygulandığında, $k_t \neq 0$ değerlerinde inversiyon simetrisi kırıldığından dejenere olan alt bantlar ayrılır. Bu spin dejenerasyonunun kalkması inversiyon simetrisinin olmamasından ve spin orbit çiftleniminin varlığından dolayıdır. $k_t = 0$ 'da $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunun ilk altı valans alt bant enerjisinin elektrik alanla değişimi incelendiğinde, $L = 100 \text{ \AA}$ ve $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk kuyuların alt bant enerjilerinin elektrik alanla değişim miktarları birbirinden farklı olduğu görülmüştür. Örneğin, elektrik alanın 0'dan 100 kV/cm 'ye çıkması ile $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için A1, A2 alt bant enerjisi yaklaşık 15 meV artarken, $L = 200 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için A1, A2 alt bant enerjisi yaklaşık olarak 60 meV artmaktadır. Baskının uygulanması ile alt bantlar $k_t = 0$ 'da dahi sadece HH (veya LH, veya SO) karakterine sahip değildir. Dolayısıyla alt bantlar $k_t = 0$ 'da HH, LH, SO karakterlerinin farklı oranlardaki karışımına sahiptir. Ayrıca baskının uygulanması ile alt bant enerjileri, baskı doğrultusu ve büyüklüğüne göre enerji ekseninde aşağıya veya yukarıya doğru kaymaktadırlar. 4×4 ve 6×6 'lık Hamiltonianlarla hesaplanan alt bantlar arasındaki farkın baskının büyüklüğü ile değişimi her baskı türü için farklıdır. Elde edilen bu sonuçlardan, spin-orbit çiftleniminin, elektrik alanın, beş farklı doğrultuda uygulanan baskının ve kuyu boyutlarının valans bandındaki alt bantlar üzerinde oldukça etkili olduğu söylenebilir.

Bölüm 9'da, $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ kuantum kuyu sistemi için ekziton enerjisi, ekziton dalga fonksiyonu ve ekziton bağlanma enerjisi 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonianı kullanılarak varyasyonel hesap tekniği çerçevesinde sonlu elemanlar yöntemi ile elde edildi. Ekziton bağlanma enerjisinin kuyu boyutlarına, elektrik alana ve beş farklı doğrultuda uygulanan baskıya bağlı değişimi incelendi. Çalışma uzayımızı en iyi şekilde üçgenlere bölmek için Perl-Olof Persson'un doktora tezi [62] çalışmasından yararlandık. Uzayın en iyi şekilde üçgenlere bölme işlemi (mesh generation) ayrı bir çalışma konusu olduğundan bu çalışmada Persson'un yazdığı basit MATLAB kodlarını biraz değiştirerek kullandık [63]. Valans bandında A sınıfı (A1, A2, ...) alt bantlardaki boşluk ile iletkenlik bandının en düşük enerjili alt bandındaki elektronun oluşturduğu

ekziton A ekzitonu (A1ekzitonu, A2 ekzitonu, ...) şeklinde isimlendirildi. Aynı şekilde valans bandında B sınıfı (B1, B2, ...) alt bantlardaki boşlukla iletkenlik bandındaki en düşük enerjili alt banttaki elektronun oluşturduğu ekziton da B ekzitonu (B1 ekzitonu, B2 ekzitonu, ...) şeklinde isimlendirildi. Ekziton hesaplarımızda her bir elementin büyüklüğünü sınırlamak için *hdata.hmax* isimli bir değişken atadık. Bu değişkenin büyüklüğü değiştirilerek uzayımızdaki toplam element sayısı değiştirilebilir. Örneğin, $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için *hdata.hmax* = 6 aldığımızda uzayımızda toplam 8470 adet üçgen element ve 4364 tane nod oluşmaktadır. Oluşturulan üçgen elementlerin ortalama kalitesi 0.957 ve üçgen elementlerden minimum kaliteli olan ise 0.697'lik kaliteye sahiptir. Üçgen elementin kalitesi, ikizkenar üçgene yakınlığının bir ölçüsüdür ve ikizkenar üçgen olduğunda 1 değerini alır. Ayrıca *hdata.hmax* = 6 durumunda uzayımızın sınır nodlarının sayısı 256'dır. Tüm ekziton hesaplarımızda toplam nod sayısının 4000'den fazla olmasını sağladık. Dolayısıyla, 4×4 'lük Luttinger-Kohn Hamiltonianı için K ve M matrislerinin en az $16\,000 \times 16\,000$ büyüklüğünde olmasına sebep oldu. Bu ise hesaplamalarımızdaki hata miktarını oldukça azaltmıştır. Ayrıca yüksek kapasiteli bilgisayarlar ile bu büyüklükteki matrislerin hesabı fazla zaman almadan yapılabilmektedir. Ekziton bağlanma enerjisi kuyu genişliğinin azalmasıyla önce artış gösterirken, sonra azalmaya başlar. Küçük L değerlerinde "Coulombic" problemin sözde iki boyutlu özelliği artar. Parçacıkların kuşatılmış enerjileri engel yüksekliğine ulaştığında iki boyutlu davranışlarının bozulmasından dolayı tekrar üç boyutlu davranış gösterirler. Büyük L değerlerinde ise, sözde iki boyutluluk bozulmakta ve ekziton üç boyutlu uzaydaki gibi davranmaya başlamaktadır. Ayrıca büyük L değerlerinde B ekzitonunun bağlanma enerjisi, A ekzitonunun bağlanma enerjisinden büyük olduğu ve L değerinin daha da azalması ile B ekzitonunun bağlanma enerjisi A ekzitonunun bağlanma enerjisinden daha küçük değer aldığı görülmüştür. Kuyu genişliğinin artması, elektron ve boşluk enerjilerinin azalmasına sebep olmakta ve dolayısıyla da ekziton enerjisi kuyu genişliğinin artması ile azalmaktadır. Elektrik alan altında elektron ve boşlukların enerjileri azaldığından ekziton enerjisi de azalmaktadır. Elektrik alanının uygulanması ile alt bantlarda inversiyon simetrisi bozulur ve ekziton enerjisindeki dejenerasyon ortadan kalmaktadır. Ekziton bağlanma enerjileri elektrik alanın artması ile azalmaktadır ($\sim 2 \text{ meV}$). Elektrik alan şiddetinin artması ile bu azalışın nedeni, elektron ve boşluğun aynı düzlemde bulunma olasılığının (overlabin) azalmasıdır. Baskı altında ekziton bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine bağlı

davranışı, baskı yok iken sahip olduğu genel davranışın benzeridir. Pozitif baskı altında ekziton bağlanma enerjisi azalırken, negatif baskı altında artmaktadır. Baskının uygulanma doğrultusuna göre, ekziton bağlanma enerjilerindeki bu artış ve azalış miktarları değişmektedir. Örneğin, $S_{||}[110]$ doğrultusunda uygulanan negatif baskı 0'dan -20 kbar 'a çıkması ile ekziton bağlanma enerjileri $L = 300 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için $\sim 6 \text{ meV}$, $L = 60 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için $\sim 5 \text{ meV}$ artmaktadır. $S_{||}[100]$ doğrultusu boyunca uygulanması durumunda ise, $L = 300 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için $\sim 5 \text{ meV}$ artmakta iken, $L = 60 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için $\sim 4 \text{ meV}$ artmaktadır. Sonuçta, ekziton bağlanma enerjisinin elektrik alana, kuyu genişliğine, baskının büyüklüğüne, baskının doğrultusuna ve baskının pozitif ya da negatif olmasına bağlı olduğu görülmüştür.

Son olarak Bölüm 10'da, TE ve TM doğrultusunda polarize olmuş ışık için $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusunda ekziton soğurma katsayısının $+z$ doğrultusunda uygulanan elektrik alana, beş farklı doğrultuda uygulanan baskıya ve kuantum kuyusunun genişliğine bağlılığı incelendi. Elektrik alan ve baskının olmadığı ve TE polarize ışık durumunda, kuyu genişliğinin azalması ile ekziton soğurma pikinin maksimum değerinin daha büyük foton enerjilerine doğru kaydığı ve bu kayma sırasında soğurma pikinin genliğinin de arttığı görülmektedir. TM polarize ışık durumunda ise, soğurma piki pozisyonlarının değişmediği ve pik genliklerinin çok küçüldüğü görülmektedir. Bunun nedeni, ekziton dalga fonksiyonunun LH bileşeninin (ϕ_2) çok küçük olmasıdır. TM polarize durumunda soğurma katsayısı ekziton dalga fonksiyonunun sadece ϕ_2 bileşenine bağlıdır. TE polarize durumunda elektrik alanın uygulanması ile A ekzitonunun pik genliği ve maksimum pik pozisyonu enerjisi azalırken, B ekzitonunun sadece pik pozisyonu enerjisi azalmaktadır. Elektrik alanın uygulanması ile B ekzitonunun pik genliği artmaktadır. Elektrik alanın uygulanmasıyla pik pozisyonu enerjisinin azalmasının nedeni, QCSE (Kuantum kuşatma Stark etkisi) ile açıklanabilir [39, 49, 65, 66]. Elektrik alanın uygulanması ile kuantum kuyusunun kuşatma potansiyeli eğilmektedir. Bunun sonucunda, elektron dalga fonksiyonu ile boşluğun dalga fonksiyonu kuyunun farklı taraflarına kayarak lokalize olmaktadır. Bu nedenden dolayı da elektron ve boşluk dalga fonksiyonları arasındaki overlap azalarak ekziton pik genliğinin elektrik alanın artması ile azalmasına neden olmaktadır. TM polarize durumunda ise, B ekzitonunun soğurma spektrumunda baskın olduğu görülmektedir. Bunun nedeni, TM polarize durumda soğurma katsayısının ekziton dalga fonksiyonunun LH bileşenine bağlı olmasında yatmaktadır. B ekzitonu, LH bileşeninin

daha baskın olduğu ekzitondur ve bundan dolayı da TM polarize durumda soğurma spektrumunda baskın olmaktadır. A ekzitonu LH bileşenini çok az içerdiğinden TM durumunda soğurma pikinin genliği B ekzitonuna göre çok küçüktür. Pozitif baskı durumunda ekziton soğurma piki pozisyonunun enerjisi $S = 0$ durumundaki foton enerjisi değerinden daha küçük foton enerjisi değerine kayarken, negatif baskı durumunda ise daha büyük foton enerjisi değerine kaymaktadır. Örneğin, $S||[100]$ boyunca uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk kuyu için $S = 20 \text{ kbar}$ 'lık baskı durumunda kayma miktarı $\sim 115 \text{ meV}$ iken, $S = -20 \text{ kbar}$ 'lık durumda ise $\sim 25 \text{ meV}$ 'dir. Bu davranışın nedeni, negatif baskı durumunda iletkenlik alt bandı enerjisi ve valans bandının ilk alt bandının enerjisi artarak efektif bant aralığını arttırması, pozitif baskı durumunda iletkenlik alt bandı enerjisinin azalması ve valans alt bant enerjisinin artmasıyla efektif bant aralığını azaltmasıdır. Uygulanan baskının doğrultusu değiştiğinde ekziton dalga fonksiyonu bileşenlerinin oranlarının farklı olmasından dolayı pik genlikleri de değişmektedir. Örneğin, $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan baskı altında $L = 100 \text{ \AA}$ 'luk $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ tek kuantum kuyusunda $S = 20 \text{ kbar}$ durumundaki ekziton dalga fonksiyonu $S = -20 \text{ kbar}$ durumundakinden daha büyük oranda HH bileşenine sahiptir. $S||[001]$ doğrultusunda uygulanan pozitif baskı altında en düşük enerjili ekziton A ekzitonu iken, negatif baskı durumunda ise B ekzitonudur. Buradaki sonuçlara bakarak, ekziton soğurma piki pozisyonunu ve genliğini elektrik alan, kuyu genişliği ve baskı ile istenilen şekilde ayarlayabiliriz.

Sonuç olarak; elektrik alanı, kuyu genişliğini, baskı doğrultusunu, baskının büyüklüğünü ve baskının uygulama yönünü değiştirerek $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyusu sisteminin elektronik ve optik özellikleri amaca uygun biçimde ayarlanabilir. Bu tezde kullanılan yöntem, baskı altındaki III-V yarıiletken bileşiklerinden oluşturulmuş kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özelliklerini iyi bir şekilde tanımlama olanağı sağlamıştır. Buradaki sonuçlar, Raman ve fotoluminensans deneylerinin sonuçları ile karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülebilir. Bu çalışmada sözü edilen dış parametrelerin değiştirilmesi ile soğurma piklerinin genliği ve pozisyonunun değiştirilebildiği görülmüştür. Dolayısıyla bu çalışmada kullanılan yöntem, baskı ile ayarlanabilen kızılötesi dedektör tasarımı uygulamalarında kullanılabilir. Ayrıca bildiğimiz kadarıyla, çoklu bant etkin kütle yaklaşımı ve sonlu elemanlar yöntemi ile $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ tek kuantum kuyu sisteminin elektronik ve optik özellikleri

üzerinde elektrik alanın, beş farklı doğrultuda uygulanan baskının ve kuyu genişliğinin etkisini konu alan bu tür kapsamlı bir çalışma yapılmamıştır.

KAYNAKLAR

1. R. Dingle, W. Wiegman, and C H. Henry, Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
2. D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C Damen, A. C Gossard, W. Wiegman, T. H. Wood, and C. A. Burrus, Phvs. Rev. B. 32, 1043 (1985).
3. G. D. Sanders and Y.-C. Chang, Phvs. Rev. B. 32, 4282 (1985).
4. A.M. Elabsy, J. Phys.: Condens. Matter 6, 10025 (1994).
5. K.I. Kolokolov, S.D. Beneslavski, N. Ya. Minina, A.M. Savin, Phys. Rev. B 63, 195308 (2001).
6. B. Gil, P. Lefebvre, P. Bonnel, H. Mathieu, C. Deparis, J. Massies, G. Neu, Y. Chen, Phys. Rev. B 47, 1954 (1993).
7. H.J. Ehrenreich, J. Appl. Phys. 32, 2155 (1961).
8. D.E. Aspens, Phys. Rev. B 14, 5331 (1976).
9. S. Adachi, J. Appl. Phys. 58, R1 (1985).
10. B. Welber, M. Cardona, C.K. Kim, S. Rodriguez, Phys.Rev. B 12, 5729 (1975); A. Jayaraman, Rev. Mod. Phys. 55, 65 (1983).
11. J. Nakahara, T. Ichimori, S. Minomura, H. Kuklmoto, J. Phys. Soc. Japan 56, 1010 (1987).
12. M. Holtz, M. Seon, O. Brafman, R. Manor, D. Fekete, Phys. Rev. B 54, 8714 (1996).
13. M. Boucenna, N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. 84, 375 (2004).
14. A. Sukumar, K. Navaneethakrishnan, Solid State Commun.76, 561 (1990).
15. G.J. Zhao, X.X. Liang, S.L. Ban, Mod. Phys. Lett. B 17, 863 (2003).
16. N. Raigoza, A.L. Morales, A. Montes, N. Porrás-Montenagro, C.A. Duque, Phys. Rev. B 69, 045323 (2004).
17. A. Montes, A.L. Morales, C.A. Duque, Surf. Rev. Lett. 9, 1753 (2002).
18. John Peter, K. Navaneethakrishnan, Solid State Commun. 130, 155 (2004).
19. G.J. Zhao, X.X. Liang, S.L. Ban, Phys. Lett. A 319, 191 (2003).
20. A.L. Morales, A. Montes, S.Y. Lopez, C.A. Duque, J. Phys.: Condens. Matter 14, 987 (2002).

21. G.A. Samara, *Phys. Rev. B* 27, 3494 (1983).
22. R.F. Kopf, M.H. Herman, M.L. Schnoes, A.P. Perley, G. Livescu, M. Ohring, *J. Appl. Phys.* 71, 5004 (1992).
23. R.O. Klepfer, F.L. Madarasz, F. Szmulowichz, *Phys. Rev. B* 51, 4633 (1995).
24. T. Fukui, H. Saito, *Appl. Phys. Lett.* 50, 824 (1987).
25. C.H. Thien, *Commun. Phys.* 7 (3), 25 (1997).
26. F. Bassani, G. Pastori Parravicini, *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Pergamon, New York, pp. 152–154, 1975.
27. Gerald Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Halsted, New York, 1988.
28. L. Esaki and R. Tsu, *Superlattices and Negative Conductivity in Semiconductors*, IBM Res. Note, Rc-2414, 1969.
29. D. Ahn, S. L. Chuang and Y. C. Chang, *J. Appl. Phys.* 64, 4056 (1988).
30. D. S. Citrin and Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* 40, 5507 (1989).
31. T. Yamauchi, Y. T. Takahasi, and Y. Arakawa, *IEEE J. Quantum Electron.* 27, 1817 (1991).
32. C. Pryor, *Phys. Rev. B* 44, 12912 (1991).
33. J. Searles and E. I. Von Nagy-Felsobuki, *Am. J. Phys.* 50, 444 (1988).
34. K. Kojima, K. Mitsunaga, and K. Kyuma, *Appl. Phys. Lett.* 55, 882 (1989).
35. K. Nakamura, A. Shimizu, M. Koshiba, and K. Hayata, *IEEE J. Quantum Electron.* 25, 889 (1989).
36. J. P. Loehr and J. Singh, *Phys. Rev. B* 42, 7154 (1990).
37. J. C. Yi and N. Dagli, *IEEE J. Quantum Electron.* 31, 208 (1995).
38. Y. P. Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* 46, 4110 (1992).
39. S. L. Chuang, *Physics Of Optoelectronic Devices* (Wiley, New York, 1995).
40. Herbert Li, *Physica E* 5, 215 (2000).
41. D. Sanders and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* 35, 2308 (1987).
42. S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* 43, 9649 (1991).

43. J. Lee and M. O. Vessel, *Phys. Rev. B* 37, 8855 (1988).
44. D. Ahn and S. L. Chuang, *J. Appl. Phys.* 64, 6143 (1988).
45. Y. Seko and A. Sakamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* 40, 34 (2001).
46. H. Sari, Doktora Tezi, C.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, (1993).
47. E.J.Austin and M. Jaros, *Phys. Rev. B* 31, 5569 (1985).
48. E.J.Austin and M. Jaros, *Appl. Phys. Lett.* 47, 274 (1985).
49. J. Thalken, W. Li, S. Haas, A.F.J. Levi, *Appl. Phys. Lett.* 85, 121 (2004).
50. D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegman, T. H. Wood, and C. A. Burrus, *Phys. Rev. Lett.* 53, 2173 (1984).
51. D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegman, T. H. Wood, and C. A. Burrus, *Appl. Phys. Lett.* 45, 13 (1984).
52. X.Huang, A.J.Seeds, J.S.Roberts, and A.P.Knights, *IEEE Photonics Technol. Lett.* 10, 1697 (1998).
53. J.E. Pask, B.M. Klein, P.A. Sterne, C.Y. Fong, *Computer Physics Communications* 135, 1 (2001).
54. W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation* (Dover, New York,1984).
55. D.D.Coon and R.P.G. Karunasiri, *Appl. Phys. Lett.* 45, 649 (1984).
56. R.K.Willardson, *Semiconductors and Semimetals* (Academic Press, New York, 1967).
57. L.C.West and S.J.Eglash, *Appl.Phys.Lett.* 46, 1156, (1985).
58. E. Kasapoglu, H. Sari, Y. Ergun and I. Sokmen, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 26, No. 6, (1999).
59. D.A.B. Miller, J.S. Weiner and D.S.Chemla, *IEEE J. Quantum Electron.* QE 22, 1816 (1986).
60. K. Wahita, Y. Kanwamura, Y. Yoshikani, H. Aoahi and S. Uehara, *IEEE J. Quantum Electron.* QE 22, 1831 (1986).
61. E. Kasapoğlu, Doktora tezi, C.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, (1999).
62. Perl-Olof Persson, Ph.D. Thesis, Department of Mathematics, MIT December 8, 2004.
63. P.-O. Persson, G. Strang, "A Simple Mesh Generator in MATLAB", *SIAM Review*, Volume 46 (2), pp. 329-345, June 2004.

64. L. Tsang and S.L. Chuang, Phys. Rev. B 42, 5229 (1990).
65. P.J. Mares and S.L.Chuang, J. Appl. Phys. 74, 1388 (1993).
66. C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, Phys.Rev. B 48, 8210 (1993).

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

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

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

$$HU_{\vec{n}\vec{k}}(\vec{r}) = \left(H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} V \times \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \right) U_{\vec{n}\vec{k}}(\vec{r}) = E' U_{\vec{n}\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1)$$

ile veriliyordu. Burada aranan, E' enerjisi ve bu enerjiye karşılık gelen

$$U_{\vec{n}\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} a_{n'} U_{n'0}(\vec{r}) \quad (2)$$

özfonksiyonları idi. ($U_{n'0}(\vec{r})$ lar band kenarı(band edge) fonksiyonlarıdır.) Çözüm için (1) deki Hamiltoniyenin (2) deki $U_{n'0}(\vec{r})$ fonksiyonları bazındaki matris temsili yazılıp, bu matrisin özdeğerleri ve özvektörleri bulunur.

1.1 Baz Kümesi

(1) de verilen Hamiltoniyenin matris temsilini arıyoruz. İlgilendiğimiz bandlar, iletkenlik bandı ve valans bandları (ağır boşluk, hafif boşluk, spin-yörünge bandı). Spinden dolayı her bir banda ait fonksiyon iki kez yozlaşmıştır (farklı iki dalga fonksiyonu ile anlatılan iki durum olan spin yukarı ve spin aşağı aynı enerjiye sahiptir). Dolayısıyla baz fonksiyonları kümesi 8 elemanlı olacaktır ((2) deki $U_{n'0}(\vec{r})$ lar). Bu elemanlardan ikisi iletkenlik bandına ait spin yukarı ve spin aşağı durumlu fonksiyonlar geri kalan 6 sı ise valans bandlarına ait spin aşağı ve spin yukarı durumlu fonksiyonlardır.

$$\begin{aligned} \{|\varphi_i\rangle\} &= \{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle, |\varphi_4\rangle, |\varphi_5\rangle, |\varphi_6\rangle, |\varphi_7\rangle, |\varphi_8\rangle\} \\ |\varphi_1\rangle &= |S \uparrow\rangle = S(r) \uparrow & |\varphi_5\rangle &= |S \downarrow\rangle = S(r) \downarrow \\ |\varphi_2\rangle &= |X \uparrow\rangle = x.f(r) \uparrow & |\varphi_6\rangle &= |X \downarrow\rangle = x.f(r) \downarrow \\ |\varphi_3\rangle &= |Y \uparrow\rangle = y.f(r) \uparrow & |\varphi_7\rangle &= |Y \downarrow\rangle = y.f(r) \downarrow \\ |\varphi_4\rangle &= |Z \uparrow\rangle = z.f(r) \uparrow & |\varphi_8\rangle &= |Z \downarrow\rangle = z.f(r) \downarrow \end{aligned} \quad (3)$$

$$(r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2})$$

(3) ile tanımlanan baz kümesinde $|\varphi_1\rangle$ ve $|\varphi_5\rangle$ iletkenlik bandına ait fonksiyonlar (s-tipi) geri kalanlar ise valans bandlarına ait (p-tipi) fonksiyonlardır. Şimdilik baz fonksiyonlarının açık formları ile ilgilenmiyoruz.

(3) baz kümesi ortonormaldir, yani

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$$

daha açık olarak yazılırsa ψ uzaya bağlı kısım ve ξ s spin değişkenine bağlı kısım olmak üzere

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \int \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \xi_k(s) \xi_l(s) dt ds = \delta_{ij} \delta_{kl}$$

yazılabilir.

1.2 Hamiltoniyenin Matris Elemanları

Hamiltoniyenin (3) bazındaki matris temsili \mathbf{H} olmak üzere matris elemanları

$$(\mathbf{H})_{ij} = \langle \varphi_i | \mathbf{H} | \varphi_j \rangle \quad i, j = 1, 2, \dots, 8 \quad (4)$$

ile tanımlıdır. H

$$\mathbf{H} = H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \quad (5)$$

ile verilir. Özel olarak $\vec{k} = k \hat{z}$ seçilsin. Bu durumda (4)

$$\mathbf{H} = H_0 + \frac{\hbar}{m_0} k \cdot p_z + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \quad (6)$$

haline gelecektir. Üçüncü terimi açalım,

$$\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p} \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left[(\vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p})_x \cdot \sigma_x + (\vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p})_y \cdot \sigma_y + (\vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p})_z \cdot \sigma_z \right]$$

olur. Dolayısıyla (6) denklemi

$$\mathbf{H} = H_0 + H_1 + H_{21} + H_{22} + H_{23} \quad (7)$$

şeklinde yazılsın. Burada

$$H_1 = \frac{\hbar}{m_0} k \cdot p_z$$

$$H_{21} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\nabla} \mathbf{V} \times \vec{p})_x \cdot \sigma_x$$

$$H_{22} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p})_y \cdot \sigma_y$$

$$H_{23} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p})_z \cdot \sigma_z$$

dır. Vektörel çarpım açılıp momentum operatörlerinin karşılıkları yazılırsa

$$H_1 = -\frac{i\hbar^2}{m_0} k \frac{\partial}{\partial z} \quad (8)$$

$$H_{21} = -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \quad (9)$$

$$H_{22} = -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \sigma_y \quad (10)$$

$$H_{23} = -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \sigma_z \quad (11)$$

Bunlardan sonra (7) den matris elemanları için

$$(H)_{ij} = (H_0)_{ij} + (H_1)_{ij} + (H_{21})_{ij} + (H_{22})_{ij} + (H_{23})_{ij} \quad i, j = 1, 2, \dots, 8 \quad (12)$$

elde edilir. (12) deki terimler (4) deki gibi (8), (9), (10), (11) den yararlanarak bulunur. $i, j = 1, 2, \dots, 8$ olmak üzere

$$(H_0)_{ij} = \langle \varphi_i | H_0 | \varphi_j \rangle \quad (13)$$

$$(H_1)_{ij} = -\frac{i\hbar^2}{m_0} k \left\langle \varphi_i \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \varphi_j \right\rangle \quad (14)$$

$$(H_{21})_{ij} = -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left\langle \varphi_i \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right| \varphi_j \right\rangle \quad (15)$$

$$(H_{22})_{ij} = -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left\langle \varphi_i \left| \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \sigma_y \right| \varphi_j \right\rangle \quad (16)$$

$$(H_{23})_{ij} = -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left\langle \varphi_i \left| \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \sigma_z \right| \varphi_j \right\rangle \quad (17)$$

1.3 Operatörlerin Baz Fonksiyonlarına Etkisi

Baz fonksiyonları uzay fonksiyonu ve spin fonksiyonunun çarpımından oluşur. σ_x , σ_y , σ_z operatörleri fonksiyonların sadece spin kısmına etki ederken $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial z$ operatörleri sadece uzay kısmına etki eder.

$$\begin{aligned} \sigma_x \uparrow = \downarrow & \quad \sigma_y \uparrow = i \downarrow & \quad \sigma_z \uparrow = \uparrow \\ \sigma_x \downarrow = \uparrow & \quad \sigma_y \downarrow = -i \uparrow & \quad \sigma_z \downarrow = -\downarrow \end{aligned} \quad (18)$$

(4) ün açılımı

$$\langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle = \int \varphi_i^* H \varphi_j d\tau ds \quad (19)$$

dir ve burada integral kristal yapıdaki hücre (uzaysal kısım, $d\tau$) ve spin (spine bağlı kısım, ds) üzerindedir. Olası iki farklı spin durumu birbiri ile orogonal olduğundan zıt spine sahip φ_i ve $H\varphi_j$ matris elemanları sıfır verecektir.

Uzaysal kısım ile ilgili integral de üç katlıdır ($dx dy dz$). Örgünün periyodikliğinden dolayı örneğin

$$\int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^c dz \dots = \int_{-a/2}^{a/2} dx \int_0^b dy \int_0^c dz \dots$$

olması gerekir. Bu durumda integrali sıfırdan farklı verecek olan integrant x in çift fonksiyonu olmalıdır. Benzer olarak y ve z ninde sınırları yukarıdaki gibi seçileceğinden aynı koşul y ve z içinde geçerlidir.

Yani (19) daki matris elemanının sıfırdan farklı olabilmesi için koşul

- φ_i ve $H\varphi_j$ nin spin durumları aynı olmalı
- İntegrant ($\varphi_i^* H \varphi_j$) uzaysal koordinatların hepsi için çift fonksiyonu olmalı

$$\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x}, \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial y}, \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial z}, \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial x}, \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial y}, \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial z}, \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x}, \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y}, \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z}$$

terimleri uzay koordinatlarından biri için tek fonksiyondur. Örneğin,

$$\frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial y} = \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} = -\frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial y} \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$y \rightarrow -y$ dönüşümü altında işaret değiştirir. Yani, y nin tek fonksiyonudur. (İntegralde y nin sınırları için $(0,b)$ yerine $(-b/2,b/2)$ alındığında bu terimi içeren integral sıfır verir.)

H_0 in baz fonksiyonlarına etkisi

$$\begin{aligned}
H_0 |\varphi_1\rangle &= E_s |\varphi_1\rangle & H_0 |\varphi_5\rangle &= E_s |\varphi_5\rangle \\
H_0 |\varphi_2\rangle &= E_p |\varphi_2\rangle & H_0 |\varphi_6\rangle &= E_p |\varphi_6\rangle \\
H_0 |\varphi_3\rangle &= E_p |\varphi_3\rangle & H_0 |\varphi_7\rangle &= E_p |\varphi_7\rangle \\
H_0 |\varphi_4\rangle &= E_p |\varphi_4\rangle & H_0 |\varphi_8\rangle &= E_p |\varphi_8\rangle
\end{aligned}$$

ile tanımlansın. (H_0 pertürbe olmamış ($\vec{k}=0$) Hamiltoniyen idi ve pertürbe olmamış durumda sistemin valans bandı altı katlı ($\vec{k}=0$ da üç band çakışık ve her biri için spin kaynaklı iki katlı yozlaşma), iletkenlik bandında iki katlı (spinden dolayı) yozlaşmaya sahipti.)

1.4. H_0 matrisi

Matris elemanları (13) ile verilen operatörün (3) bazındaki matris temsili bulunacak. Operatörün baz fonksiyonlarına etkisi (20) ile tanımlanmıştır.

$$\begin{aligned}
(H_0)_{ij} &= \langle \varphi_i | H_0 | \varphi_j \rangle \\
H_0 &= \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | H_0 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | H_0 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | H_0 | \varphi_8 \rangle \\ \langle \varphi_2 | H_0 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | H_0 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | H_0 | \varphi_8 \rangle \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_8 | H_0 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_8 | H_0 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_8 | H_0 | \varphi_8 \rangle \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$(H_0)_{11} = \langle \varphi_1 | H_0 | \varphi_1 \rangle = \langle S \uparrow | H_0 | S \uparrow \rangle = \langle S \uparrow | E_s S \uparrow \rangle = E_s \langle S \uparrow | S \uparrow \rangle = E_s$$

$$(H_0)_{12} = \langle \varphi_1 | H_0 | \varphi_2 \rangle = \langle S \uparrow | H_0 | X \uparrow \rangle = \langle S \uparrow | E_p X \uparrow \rangle = E_p \langle S \uparrow | X \uparrow \rangle = 0$$

Aynı işlemler diğer elemanlar için yapıлып baz fonksiyonlarının ortonormalliği kullanılırsa bu matriste sadece köşegen elemanlarının olduğu görülebilir.

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_s & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p \end{pmatrix}$$

H_0 matrisi hermitiktir.

1.5. H_1 matrisi

Matris elemanları (14) ile verilen operatörün (3) bazındaki matris temsili bulunacak.

$$(H_1)_{ij} = \langle \varphi_i | H_1 | \varphi_j \rangle$$

$$H_1 = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_8 \rangle \\ \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_8 \rangle \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \langle \varphi_8 | H_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_8 | H_1 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_8 | H_1 | \varphi_8 \rangle \end{pmatrix}$$

Şimdilik matris elemanının değerinden çok sıfır olup olmadığı ile ilgilendiğimizden (14) ün sağındaki sabiti dikkate almadan matris elemanlarını hesaplayalım.

$$(H_1)_{11} = \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_1 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| S \uparrow \right\rangle = \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial S(r) \uparrow}{\partial z} d\tau ds = \int S^*(r) \frac{\partial S(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

Çünkü, integrand uzaysal koordinatlardan z için tek fonksiyon (son yazılan integraldeki ilk terim çift, ikincisi (türev) tek; dolayısıyla bunların ikisinin çarpımından oluşan integrand z için tek)

$$(H_1)_{12} = \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_2 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| X \uparrow \right\rangle = \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial [X \cdot f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int X S^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

(son yazılan integral içindeki ilk ve üçüncü terimlerden dolayı, integrand x ve z nin tek fonksiyonu)

$$(H_1)_{13} = \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_3 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| Y \uparrow \right\rangle = \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial [Y \cdot f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int Y S^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

(son yazılan integral içindeki ilk ve üçüncü terimlerden dolayı, integrand y ve z nin tek fonksiyonu)

$$(H_1)_{14} = \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_4 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| Z \uparrow \right\rangle = \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial [Z \cdot f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds$$

$$= \int S^*(r) f(r) d\tau + \int Z S^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau \neq 0$$

(son satırdaki integrallerin integrandları uzay koordinatlarının tümünün çift fonksiyonu, ikinci integraldeki ilk ve üçüncü terimlerden her ikisinde z nin tek fonksiyonu dolayısıyla çarpımları çift yani integrand tüm koordinatların çift fonksiyonu)

$$(H_1)_{15} = \langle \varphi_1 | H_1 | \varphi_5 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| S \downarrow \right\rangle = 0$$

Çünkü, aradaki operatör spin durumunu değiştirmeyecektir ve spin durumları farklı olduğundan spin üzerinden integral sıfır verecektir. Aynı sebepten dolayı $(H_1)_{16} = (H_1)_{17} = (H_1)_{18} = 0$ olacaktır.

$$(H_1)_{21} = \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_1 \rangle = \left\langle X \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| S \uparrow \right\rangle = \int x f^*(r) \uparrow \frac{\partial S(r) \uparrow}{\partial z} d\tau ds = \int x f^*(r) \frac{\partial S(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{22} = \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_2 \rangle = \left\langle X \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| X \uparrow \right\rangle = \int x f^*(r) \uparrow \frac{\partial [x f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int x^2 f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{23} = \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_3 \rangle = \left\langle X \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| Y \uparrow \right\rangle = \int x f^*(r) \uparrow \frac{\partial [y f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int x y f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{24} = \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_4 \rangle = \left\langle X \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| Z \uparrow \right\rangle = \int x f^*(r) \uparrow \frac{\partial [z f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds$$

$$= \int x f^*(r) f(r) d\tau + \int x z f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{25} = \langle \varphi_2 | H_1 | \varphi_5 \rangle = \left\langle X \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| S \downarrow \right\rangle = \int x f^*(r) \uparrow \frac{\partial [S(r) \downarrow]}{\partial z} d\tau ds = 0$$

$(H_1)_{25}$ integraldeki fonksiyonların spin durumlarının ortogonalliğinden dolayı sıfır oldu. Aynı sebepten dolayı $(H_1)_{26} = (H_1)_{27} = (H_1)_{28} = 0$ olacaktır.

$$(H_1)_{31} = \langle \varphi_3 | H_1 | \varphi_1 \rangle = \left\langle Y \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| S \uparrow \right\rangle = \int y f^*(r) \uparrow \frac{\partial [S(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int y f^*(r) \frac{\partial S(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{32} = \langle \varphi_3 | H_1 | \varphi_2 \rangle = \left\langle Y \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| X \uparrow \right\rangle = \int y f^*(r) \uparrow \frac{\partial [x f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int y x f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{33} = \langle \varphi_3 | H_1 | \varphi_3 \rangle = \left\langle Y \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| Y \uparrow \right\rangle = \int y f^*(r) \uparrow \frac{\partial [y f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int y^2 f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{34} = \langle \varphi_3 | H_1 | \varphi_4 \rangle = \left\langle Y \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| Z \uparrow \right\rangle = \int y f^*(r) \uparrow \frac{\partial [z f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds$$

$$= \int y f^*(r) f(r) d\tau + \int y z f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{35} = \langle \varphi_3 | H_1 | \varphi_5 \rangle = \left\langle Y \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| S \downarrow \right\rangle = \int y f^*(r) \uparrow \frac{\partial [S(r) \downarrow]}{\partial z} d\tau ds = 0$$

Benzer olarak $(H_1)_{36} = (H_1)_{37} = (H_1)_{38} = 0$ dır.

$$(H_1)_{41} = \langle \varphi_4 | H_1 | \varphi_1 \rangle = \left\langle Z \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial Z} \right| S \uparrow \right\rangle = \int z f^*(r) \uparrow \frac{\partial [S(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int z f^*(r) \frac{\partial S(r)}{\partial z} d\tau \neq 0$$

Çünkü, son yazılan integralde ilk ve üçüncü terim z de tek, dolayısıyla çarpımları çift yani integrand çifttir.

$$(H_1)_{42} = \langle \varphi_4 | H_1 | \varphi_2 \rangle = \left\langle Z \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial Z} \right| X \uparrow \right\rangle = \int z f^*(r) \uparrow \frac{\partial [x.f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int z x f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$(H_1)_{43} = \langle \varphi_4 | H_1 | \varphi_3 \rangle = \left\langle Z \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial Z} \right| Y \uparrow \right\rangle = \int z f^*(r) \uparrow \frac{\partial [y.f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds = \int z y f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0$$

$$\begin{aligned} (H_1)_{44} &= \langle \varphi_4 | H_1 | \varphi_4 \rangle = \left\langle Z \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial Z} \right| Z \uparrow \right\rangle = \int z f^*(r) \uparrow \frac{\partial [z.f(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds \\ &= \int z f^*(r) f(r) d\tau + \int z^2 f^*(r) \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau = 0 \end{aligned}$$

$$(H_1)_{45} = \langle \varphi_4 | H_1 | \varphi_5 \rangle = \left\langle Z \uparrow \left| \frac{\partial}{\partial Z} \right| S \downarrow \right\rangle = \int z f^*(r) \uparrow \frac{\partial [S(r) \downarrow]}{\partial z} d\tau ds = 0$$

Benzer olarak $(H_1)_{46} = (H_1)_{47} = (H_1)_{48} = 0$ dır.

(3) den ilk dört baz fonksiyonu ile son dördünün aynı uzaysal kısma sahip olduğu görülebilir. Bu iki kümede farklı olan sadece spin kısımlarıdır. Dolayısıyla buraya kadar yapılan hesapların aynılarının son dört baz fonksiyonu için yapılması gereksizdir.

Sonuç olarak H_1 matrisinde sıfırdan farklı elemanlar;

$$(H_1)_{14}, (H_1)_{41}, (H_1)_{58}, (H_1)_{85}$$

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & ikP & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -ikP & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ikP \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -ikP & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

$$P \equiv -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle \quad (23)$$

H_1 matrisi hermitiktir.

1.6. H_{21} matrisi

Matris elemanları (15) ile verilen operatörün (3) bazındaki matris temsili bulunacak.

$$(H_{21})_{ij} = \langle \varphi_i | H_{21} | \varphi_j \rangle$$

$$H_{21} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | H_{21} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | H_{21} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | H_{21} | \varphi_8 \rangle \\ \langle \varphi_2 | H_{21} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | H_{21} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | H_{21} | \varphi_8 \rangle \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \langle \varphi_8 | H_{21} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_8 | H_{21} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_8 | H_{21} | \varphi_8 \rangle \end{pmatrix}$$

(15) in sağındaki sabiti dikkate almadan matris elemanlarını hesaplayalım.

$$(H_{21})_{11} = \langle \varphi_1 | H_{21} | \varphi_1 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right| S \uparrow \right\rangle = \left\langle S \uparrow \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right| S \downarrow \right\rangle = 0$$

(18) ve spin kısmının ortogonalliği kullanıldı. Benzer olarak $(H_{21})_{12} = (H_{21})_{13} = (H_{21})_{14} = 0$ dir.

$$(H_{21})_{15} = \langle \varphi_1 | H_{21} | \varphi_5 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right| S \downarrow \right\rangle = \left\langle S \uparrow \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right| S \uparrow \right\rangle$$

$$= \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right| S \uparrow \right\rangle - \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right| S \uparrow \right\rangle$$

$$= \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial S(r) \uparrow}{\partial z} d\tau ds - \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial S(r) \uparrow}{\partial y} d\tau ds$$

$$= \int S^*(r) \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial S(r)}{\partial z} d\tau - \int S^*(r) \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial S(r)}{\partial y} d\tau = 0$$

$$(H_{21})_{16} = \langle \varphi_1 | H_{21} | \varphi_6 \rangle = \left\langle S \uparrow \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right| X \downarrow \right\rangle = \left\langle S \uparrow \left| \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right| X \uparrow \right\rangle$$

$$= \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right| X \uparrow \right\rangle - \left\langle S \uparrow \left| \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right| X \uparrow \right\rangle$$

$$= \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial [xf(r) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds - \int S^*(r) \uparrow \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial [xf(r) \uparrow]}{\partial y} d\tau ds$$

$$= \int x S^*(r) \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial f(r)}{\partial z} d\tau - \int x S^*(r) \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial f(r)}{\partial y} d\tau = 0$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{H}_{21})_{17} &= \langle \varphi_1 | \mathbf{H}_{21} | \varphi_7 \rangle = \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right) \mathbf{Y} \downarrow \right\rangle = \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) \mathbf{Y} \uparrow \right\rangle \\
&= \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{Y} \uparrow \right\rangle - \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \mathbf{Y} \uparrow \right\rangle \\
&= \int \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \uparrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial [yf(\mathbf{r}) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds - \int \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \uparrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial [yf(\mathbf{r}) \uparrow]}{\partial y} d\tau ds \\
&= \int y \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z} d\tau - \int \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} f(\mathbf{r}) d\tau - \int y \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y} d\tau = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{H}_{21})_{18} &= \langle \varphi_1 | \mathbf{H}_{21} | \varphi_8 \rangle = \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right) \mathbf{Z} \downarrow \right\rangle = \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle \\
&= \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle - \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle \\
&= \int \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \uparrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial [zf(\mathbf{r}) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds - \int \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \uparrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial [zf(\mathbf{r}) \uparrow]}{\partial y} d\tau ds \\
&= \int z \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z} d\tau + \int \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} f(\mathbf{r}) d\tau - \int z \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y} d\tau = 0
\end{aligned}$$

Benzer olarak diğer terimler de çıkarılabilir. Sıfırdan farklı bir matris elemanına örnek olarak,

$$\begin{aligned}
(\mathbf{H}_{21})_{38} &= \langle \varphi_3 | \mathbf{H}_{21} | \varphi_8 \rangle = \left\langle \mathbf{Y} \uparrow \left(\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \sigma_x \right) \mathbf{Z} \downarrow \right\rangle = \left\langle \mathbf{Y} \uparrow \left(\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle \\
&= \left\langle \mathbf{Y} \uparrow \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle - \left\langle \mathbf{Y} \uparrow \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle \\
&= \int y f^*(\mathbf{r}) \uparrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial [zf(\mathbf{r}) \uparrow]}{\partial z} d\tau ds - \int y f^*(\mathbf{r}) \uparrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial [zf(\mathbf{r}) \uparrow]}{\partial y} d\tau ds \\
&= \int y z f^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z} d\tau + \int y f^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} f(\mathbf{r}) d\tau - \int y z f^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y} d\tau \neq 0
\end{aligned}$$

Her üç integraldeki integrand da tüm koordinatlara göre çifttir. Örneğin, ilk integrantın ilk iki terimi y, z ye göre tektir, (üçüncü çift) dördü ve beşinci (türevler) de y, z ye göre tektir. Dolayısıyla integrand çift olacaktır (iki tek fonksiyonun çarpımı çifttir).

Sonuç olarak \mathbf{H}_{21} matrisinde sıfırdan farklı elemanlar:

$$(\mathbf{H}_{21})_{38}, (\mathbf{H}_{21})_{47}, (\mathbf{H}_{21})_{74}, (\mathbf{H}_{21})_{83}$$

$$\mathbf{H}_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Delta/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (24)$$

$$\Delta \equiv \frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \left\langle \mathbf{Y} \left| \frac{\partial V}{\partial y} p_z - \frac{\partial V}{\partial z} p_y \right| \mathbf{Z} \right\rangle \quad (25)$$

\mathbf{H}_{21} matrisi hermitiktir.

1.7. \mathbf{H}_{22} matrisi

Matris elemanları (16) ile verilen operatörün (3) bazındaki matris temsili bulunacak.

$$(\mathbf{H}_{22})_{ij} = \langle \varphi_i | \mathbf{H}_{22} | \varphi_j \rangle$$

$$\mathbf{H}_{22} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_8 \rangle \\ \langle \varphi_2 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_8 \rangle \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \langle \varphi_8 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_8 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_8 | \mathbf{H}_{22} | \varphi_8 \rangle \end{pmatrix}$$

matris elemanları hesaplanırsa matris şu şekilde bulunacaktır;

$$\mathbf{H}_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (26)$$

$$\Delta \equiv \frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \left\langle \mathbf{Z} \left| \frac{\partial V}{\partial z} p_x - \frac{\partial V}{\partial x} p_z \right| \mathbf{X} \right\rangle \quad (27)$$

\mathbf{H}_{22} matrisi hermitiktir.

Matris elemanları bulunurken dikkat edilmesi gereken bir konu \mathbf{H}_{22} operatörünün (18) de verilen spin kısmının (σ_y) etkisidir.

1.8. H_{23} matrisi

Matris elemanları (17) ile verilen operatörün (3) bazındaki matris temsili bulunacak.

$$(H_{23})_{ij} = \langle \varphi_i | H_{23} | \varphi_j \rangle$$

$$H_{23} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | H_{23} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | H_{23} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | H_{23} | \varphi_8 \rangle \\ \langle \varphi_2 | H_{23} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | H_{23} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | H_{23} | \varphi_8 \rangle \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \langle \varphi_8 | H_{23} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_8 | H_{23} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_8 | H_{23} | \varphi_8 \rangle \end{pmatrix}$$

matris elemanları hesaplanırsa matris şu şekilde bulunacaktır;

$$H_{23} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Delta/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$\Delta \equiv \frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right| Y \right\rangle \quad (29)$$

H_{23} matrisi hermitiktir. (25), (27) ve (29) ile tanımlı olan değişkenler, spin yörünge ile ilgili olan operatörün farklı bileşenlerinin matris elemanlarıdır ve birbirlerine eşittir.

1.9. Hamiltoniyeinin Matris Temsili

(7) ile verilen Hamiltoniyeinin (3) bazındaki matris temsili; (12), (21), (22), (24), (26) ve (28) den

$$H = \begin{pmatrix} E_s & 0 & 0 & ikP & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_p & -i\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta/3 \\ 0 & i\Delta/3 & E_p & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Delta/3 \\ -ikP & 0 & 0 & E_p & 0 & -\Delta/3 & i\Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_s & 0 & 0 & ikP \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta/3 & 0 & E_p & i\Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\Delta/3 & 0 & -i\Delta/3 & E_p & 0 \\ 0 & \Delta/3 & i\Delta/3 & 0 & -ikP & 0 & 0 & E_p \end{pmatrix} \quad (30)$$

olur. Hermitik bir matris olan H deki değişkenler (23), (25), (27) ve (29) ile tanımlıdır.

1.10. Farklı Baz Kümesi Seçimi

$$\begin{aligned}
 |\varphi'_1\rangle &= |iS \downarrow\rangle = iS(r) \downarrow & |\varphi'_5\rangle &= |iS \uparrow\rangle = iS(r) \uparrow \\
 |\varphi'_2\rangle &= \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle = \frac{x-iy}{\sqrt{2}} f(r) \uparrow & |\varphi'_6\rangle &= \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle = -\frac{x+iy}{\sqrt{2}} f(r) \downarrow \\
 |\varphi'_3\rangle &= |Z \downarrow\rangle = zf(r) \downarrow & |\varphi'_7\rangle &= |Z \uparrow\rangle = zf(r) \uparrow \\
 |\varphi'_4\rangle &= \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle = -\frac{x+iy}{\sqrt{2}} f(r) \uparrow & |\varphi'_8\rangle &= \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle = \frac{x-iy}{\sqrt{2}} f(r) \downarrow
 \end{aligned} \quad (31)$$

(31) ile (3) baz kümesi arasındaki ilişki

$$\begin{pmatrix} |\varphi'_1\rangle \\ |\varphi'_2\rangle \\ |\varphi'_3\rangle \\ |\varphi'_4\rangle \\ |\varphi'_5\rangle \\ |\varphi'_6\rangle \\ |\varphi'_7\rangle \\ |\varphi'_8\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_1\rangle \\ |\varphi_2\rangle \\ |\varphi_3\rangle \\ |\varphi_4\rangle \\ |\varphi_5\rangle \\ |\varphi_6\rangle \\ |\varphi_7\rangle \\ |\varphi_8\rangle \end{pmatrix} \quad (32)$$

ile verilebilir. Bu da

$$\begin{aligned}
 |\varphi'\rangle &= U|\varphi\rangle \\
 |\varphi'_i\rangle &= \sum_{j=1}^8 U_{ij} |\varphi_j\rangle
 \end{aligned} \quad (33)$$

şeklinde yazılabilir. H , (1) deki Hamiltoniyenin $\{|\varphi_i\rangle\}$ ($i=1,2,\dots,8$) bazındaki matris temsili ve H' , $\{|\varphi'_i\rangle\}$ ($i=1,2,\dots,8$) bazındaki matris temsili olsun. Bu iki temsil arasında (4) den

$$(H)_{ij} = \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle; \quad i, j = 1, 2, \dots, 8$$

$$(H')_{ij} = \langle \varphi'_i | H | \varphi'_j \rangle; \quad i, j = 1, 2, \dots, 8$$

(33) den

$$(H')_{ij} = \langle \varphi_i U^{-1\dagger} | H | U^{-1} \varphi_j \rangle$$

U nun üniterliğinden $U^{-1} = U^\dagger$

$$(H')_{ij} = \langle \varphi_i | U H U^\dagger | \varphi_j \rangle$$

yani,

$$H' = UHU^\dagger \quad (34)$$

ilişkisi vardır.

1.11. Farklı Baz Kümesindeki Matris Temsili

Bölüm (2.4) de (3) baz kümesi kullanılarak yapılan işlemlerin aynısı bu sefer (31) baz kümesi için yapılırsa (1) de verilen Hamiltoniyenin (31) bazındaki matris temsili bulunmuş olacaktır.

$$H' = \begin{pmatrix} E_s & 0 & kP & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_p - \Delta/3 & \sqrt{2}\Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ kP & \sqrt{2}\Delta/3 & E_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p + \Delta/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_s & 0 & kP & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p - \Delta/3 & \sqrt{2}\Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & kP & \sqrt{2}\Delta/3 & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p + \Delta/3 \end{pmatrix} \quad (35)$$

H' matrisinin de Hermitik olduğu görülebilir.

Böylece verilen Hamiltoniyenin seçilen bir bazdaki matris temsili elde edilebilir.

EK-2

BASKI DURUMLARINA GÖRE ZORLANMA MATRİSİNİN ELEMANLARI

Dış kuvvet uygulanarak deformasyona uğrayan ve daha sonra tekrar deformasyona uğramadan önceki biçimine geri dönen bir katı maddenin bu özelliği elastikliği ile ilgilidir. Belirli bir alana uygulanan dış kuvvet baskı (stress) olarak adlandırılırken deformasyonun miktarı ise zorlanma (strain) olarak adlandırılır. Bu ekte baskı ve zorlanma üzerinde kısaca durularak, bunlar arasındaki ilişki özetle verilecektir.

Baskı (Stress): Kartezyen koordinat sistemine yerleştirilmiş bir katı madde göz önüne alalım. Bu katı madde üzerine birçok kuvvetin etkiğini düşünelim. Fakat etkiyen kuvvetlerin vektörel toplamı sıfır olsun. x eksenine dik ΔA_x büyüklüğündeki alana etkiyen toplam kuvvet

$$\Delta \vec{F} = \Delta F_x \hat{i} + \Delta F_y \hat{j} + \Delta F_z \hat{k}$$

olur. Bu durumda aşağıdaki nicelikler tanımlanır:

$$T_{xx} = \lim_{\Delta A_x \rightarrow 0} \frac{\Delta F_x}{\Delta A_x} \quad T_{xy} = \lim_{\Delta A_x \rightarrow 0} \frac{\Delta F_y}{\Delta A_x} \quad T_{xz} = \lim_{\Delta A_x \rightarrow 0} \frac{\Delta F_z}{\Delta A_x}$$

T_{ij} 'deki i ve j indisleri sırasıyla düzlemi ve kuvvetin doğrultusunu ifade eder. Benzer olarak y ve z eksenlerine dik küçük parçaların alanları için ise,

$$T_{yx} = \lim_{\Delta A_y \rightarrow 0} \frac{\Delta F_x}{\Delta A_y} \quad T_{yy} = \lim_{\Delta A_y \rightarrow 0} \frac{\Delta F_y}{\Delta A_y} \quad T_{yz} = \lim_{\Delta A_y \rightarrow 0} \frac{\Delta F_z}{\Delta A_y}$$

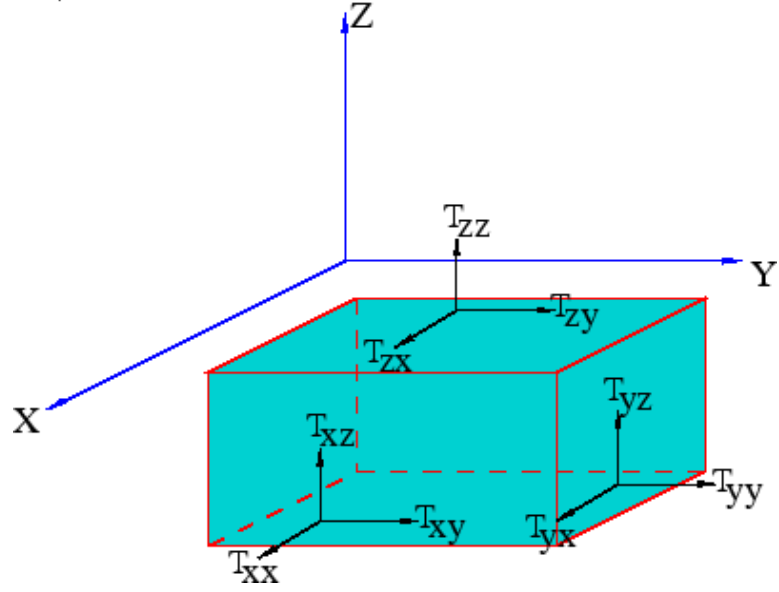
ve

$$T_{zx} = \lim_{\Delta A_z \rightarrow 0} \frac{\Delta F_x}{\Delta A_z} \quad T_{zy} = \lim_{\Delta A_z \rightarrow 0} \frac{\Delta F_y}{\Delta A_z} \quad T_{zz} = \lim_{\Delta A_z \rightarrow 0} \frac{\Delta F_z}{\Delta A_z}$$

olur. Bu skaler nicelikler matris formunda yazılırsa

$$\bar{T} = \begin{pmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{pmatrix}$$

şeklinde baskı matrisi elde edilir. Statik denge durumunda $T_{ij} = T_{ji}$ 'dir.



Şekil E2.1. Baskı matrisinin elemanları

Zorlanma (Strain): Elastik deformasyon altındaki bir cismin x , y ve z eksenleri doğrultusundaki görelî yerdeğiştirmeleri u_x , u_y ve u_z olsun. Bu durumda deformasyona uğrayan katı maddenin zorlanma bileşenleri $i, j = x, y, z$ ve $x_x = x$, $x_y = y$, $x_z = z$ olmak üzere,

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

şeklinde tanımlanır [J.F.Nye, Physical Properties of Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1957]. Zorlanma tensörü simetriktir ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$) ve zorlanma matrisi

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

şeklinde yazılır. Literatürde ve mühendislikte bazen zorlanma elemanları olarak e_{ij} 'ler kullanılmaktadır. Bu zorlanma elemanları ile bizim kullandığımız zorlanma elemanları

$$\begin{aligned} e_{ij} &= \varepsilon_{ij} & , i = j \\ e_{ij} &= 2\varepsilon_{ij} & , i \neq j \end{aligned}$$

şeklinde birbirine bağlıdır.

Baskı ve zorlanma arasındaki ilişkiyi ilk olarak Robert Hook tanımlamıştır[Hook78]. Elastik teorideki Hook yasası bir yaklaşımdır ve bu yaklaşıma göre bir cisme uygulanan baskı ile deformasyon miktarı (zorlanma) birbirine lineer olarak bağlıdır. En genel ifade ile baskı ve zorlanma matematiksel olarak

$$T_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{ij}$$

şeklinde birbirine bağlıdır. Burada C_{ijkl} , 81 sabiti içeren dördüncü dereceden elastik sıkışma tensörüdür (elastic stiffness tensor). Bu sabitlerin sayısı katı maddenin kristal simetrisine bağlı olarak indirgenebilir. Çinko sülfür (Zinc blende) yapıdaki katı maddeler (Si, Ge, GaAs, AlGaAs gibi) için elastik sabitler birbirinden bağımsız üç sabite indirgenir (C_{11} , C_{12} ve C_{44}). Bu sabitler elastik sıkışma sabitleri (elastic stiffness constants) olarak bilinir.

Hook yasasını genel olarak matris formunda

$$\begin{pmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \\ T_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix}$$

şeklinde yazılabilir. Zorlanma matrisi elemanları Hook yasası ters çevrilerek de elde edilebilir. O zaman

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \cdot T_{ij}$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \\ T_{xy} \end{pmatrix}$$

olur. Burada S_{ijkl} , elastik gevşeme sabitlerini (elastic compliance constants) ifade eder. Kübik simetriye sahip kristaller için S_{ijkl} tensörünün de birbirinden bağımsız sadece üç sabiti vardır (S_{11} , S_{12} ve S_{44}). Elastik gevşeme matrisi ile elastik sıkışma matrisi arasında

$$\bar{S} = \bar{C}^{-1}$$

bağıntısı vardır. Buna göre,

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2}$$

$$S_{12} = -\frac{C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2}$$

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}}$$

olur. Bu durumda çinko sülfür yapıdaki kübik kristaller için Hook yasası,

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \\ T_{xy} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \\ T_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix}$$

şeklindedir.

Eğer çinko sülfür kristal yapısına sahip bir yarıiletken kristale aşağıdaki doğrultularda P büyüklüğünde baskı uygulanırsa;

1. **Durum;** Baskı x eksenine doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{T}}_{[100]} = \begin{pmatrix} P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

olur.

2. **Durum;** Baskı z eksenine doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{T}}_{[001]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix}$$

olur.

3. **Durum;** Baskı $[110]$ doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{T}}_{[110]} = \begin{pmatrix} P/2 & P/2 & 0 \\ P/2 & P/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

olur.

4. **Durum;** Baskı $[111]$ doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{T}}_{[111]} = \begin{pmatrix} P/3 & P/3 & P/3 \\ P/3 & P/3 & P/3 \\ P/3 & P/3 & P/3 \end{pmatrix}$$

olur.

5. **Durum;** Baskı hidrostatik ise,

$$\bar{\bar{T}}_{[hyd]} = \begin{pmatrix} P & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix}$$

olur.

Yukarıdaki beş durum için Hook yasası kullanılırsa zorlanma matrisleri;

1. Durum; Baskı x eksenini doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{[100]} = \begin{pmatrix} S_{11}P & 0 & 0 \\ 0 & S_{12}P & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}P \end{pmatrix}$$

olur.

2. Durum; Baskı z eksenini doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{[001]} = \begin{pmatrix} S_{12}P & 0 & 0 \\ 0 & S_{12}P & 0 \\ 0 & 0 & S_{11}P \end{pmatrix}$$

olur.

3. Durum; Baskı $[110]$ doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{[110]} = \begin{pmatrix} (S_{11} + S_{12})P/2 & S_{44}P/4 & 0 \\ S_{44}P/4 & (S_{11} + S_{12})P/2 & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}P \end{pmatrix}$$

olur.

4. Durum; Baskı $[111]$ doğrultusu boyunca ise,

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{[111]} = \begin{pmatrix} (S_{11} + 2S_{12})P/3 & S_{44}P/6 & S_{44}P/6 \\ S_{44}P/6 & (S_{11} + 2S_{12})P/3 & S_{44}P/6 \\ S_{44}P/6 & S_{44}P/6 & (S_{11} + 2S_{12})P/3 \end{pmatrix}$$

olur.

5. Durum; Baskı hidrostatik ise,

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{[hyd]} = \begin{pmatrix} (S_{11} + 2S_{12})P/3 & 0 & 0 \\ 0 & P(S_{11} + 2S_{12})P/3 & 0 \\ 0 & 0 & (S_{11} + 2S_{12})P/3 \end{pmatrix}$$

olur.

Yukarıdaki zorlanma matris elemanları Pikus-Bir hamiltoniyeninde kullanıldığında baskının beş durumu için çinko sülfür yapıdaki yarıiletkenlerin elektronik bant yapısı basınca bağlı olarak elde edilir. Burada baskının büyüklüğü P pozitif ise, baskı gerilme (tensile stress) biçimindedir. Eğer P negatif ise, o zaman baskı sıkıştırılma (compressive stress) biçiminde olur.

EK-3

$\overline{H_A}$, $\overline{H_B}$ VE $\overline{H_C}$ 'NİN AÇIK BIÇİMLERİ

$\frac{\hbar^2}{2m_0} = Ryd.a_B^2$ olduğundan $\overline{\overline{H_A}}$, $\overline{\overline{H_B}}$ ve $\overline{\overline{H_C}}$ 'nin açık biçimleri aşağıdaki gibi

yazılabilir. ($Ryd = 13.60568720450687 \text{ eV}$, $a_B = 0.5291774064577985 \text{ \AA}$)

$$\overline{\overline{H_A}} = -Ryd.a_B^2 \begin{bmatrix} \gamma_1 - 2\gamma_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 + 2\gamma_2 & 0 & 0 & 2\sqrt{2}\gamma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1 + 2\gamma_2 & 0 & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_1 - 2\gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2}\gamma_2 & 0 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2 & 0 & 0 & \gamma_1 \end{bmatrix}$$

$$\overline{\overline{H_B}} = -Ryd.a_B^2 \begin{bmatrix} 0 & -2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 & 0 & -\sqrt{6}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 \\ -2\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\sqrt{2}\gamma_3(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) & 3\sqrt{2}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 & 0 & -\sqrt{6}\gamma_3(k_x + ik_y) \\ -\sqrt{6}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 & 3\sqrt{2}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3\sqrt{2}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 & -\sqrt{6}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\overline{\overline{H_C}} = - \begin{bmatrix} \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{11} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{12} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{13} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{14} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{15} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{16} \\ \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{21} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{22} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{23} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{24} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{25} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{26} \\ \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{31} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{32} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{33} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{34} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{35} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{36} \\ \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{41} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{42} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{43} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{44} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{45} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{46} \\ \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{51} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{52} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{53} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{54} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{55} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{56} \\ \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{61} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{62} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{63} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{64} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{65} & \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{66} \end{bmatrix}$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{11} = Ryd.a_B^2\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{12} = d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{13} = R ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{14} = 0 ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{15} = \frac{1}{\sqrt{2}}d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{16} = \sqrt{2}R ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{21} = d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{22} = Ryd.a_B^2\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{23} = 0 ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{24} = R ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{25} = -\sqrt{2}\left(Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\right) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{26} = -\sqrt{\frac{3}{2}}d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{31} = R^\dagger ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{32} = 0 ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{33} = Ryd.a_B^2\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{34} = -d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{35} = -\sqrt{\frac{3}{2}}d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{36} = \sqrt{2}\left(Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\right) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{41} = 0 ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{42} = R^\dagger ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{43} = -d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{44} = Ryd.a_B^2\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{45} = -\sqrt{2}R^\dagger ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{46} = \frac{1}{\sqrt{2}}d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{51} = \frac{1}{\sqrt{2}}d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{52} = -\sqrt{2}\left(Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\right) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{53} = -\sqrt{\frac{3}{2}}d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{54} = -\sqrt{2}R ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{55} = Ryd.a_B^2\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \Delta ; \left(\overline{\overline{H_C}}\right)_{56} = 0 ;$$

$$\left(\overline{H_C}\right)_{61} = \sqrt{2}R^\dagger ; \left(\overline{H_C}\right)_{62} = -\sqrt{\frac{3}{2}}d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) ;$$

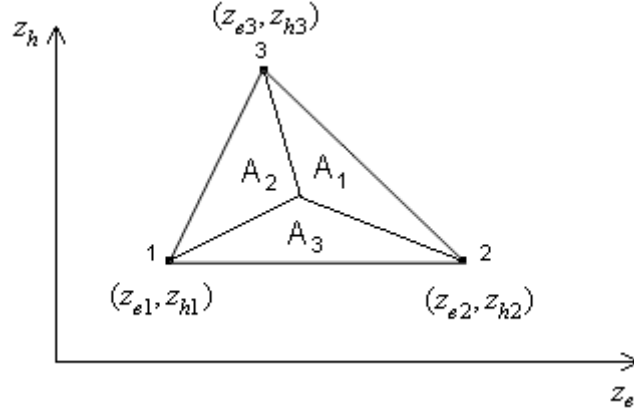
$$\left(\overline{H_C}\right)_{63} = \sqrt{2}\left(Ryd.a_B^2\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\right) ; \left(\overline{H_C}\right)_{64} = \frac{1}{\sqrt{2}}d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) ;$$

$$\left(\overline{H_C}\right)_{65} = 0 ; \left(\overline{H_C}\right)_{66} = Ryd.a_B^2\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \Delta ;$$

EK-4

ÜÇGEN GLOBAL ELEMENTİN ALAN KOORDİNATLARI, BİÇİM
FONKSİYONLARI VE BU FONKSİYONLAR KULLANILARAK HESAPLANAN
İNTEGRALLER

4.1. Üçgen Global Elementin Alan Koordinatları Ve Biçim Fonksiyonları



Yukarıdaki gibi herhangi bir j . Global elementi göz önüne alalım. Bu elementin alanı A ise,

$$A = A_1 + A_2 + A_3$$

$$A = \frac{1}{2} \det \begin{vmatrix} 1 & z_{e1} & z_{h1} \\ 1 & z_{e2} & z_{h2} \\ 1 & z_{e3} & z_{h3} \end{vmatrix}$$

$$A_1 = \frac{1}{2} \det \begin{vmatrix} 1 & z_e & z_h \\ 1 & z_{e2} & z_{h2} \\ 1 & z_{e3} & z_{h3} \end{vmatrix}$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \det \begin{vmatrix} 1 & z_{e1} & z_{h1} \\ 1 & z_e & z_h \\ 1 & z_{e3} & z_{h3} \end{vmatrix}$$

$$A_3 = \frac{1}{2} \det \begin{vmatrix} 1 & z_{e1} & z_{h1} \\ 1 & z_{e2} & z_{h2} \\ 1 & z_e & z_h \end{vmatrix}$$

Buradan alan koordinatları için,

$$L_1 = \frac{A_1}{A}$$

$$L_2 = \frac{A_2}{A}$$

$$L_3 = \frac{A_3}{A}$$

$$L_1 = \frac{1}{2A} \det \begin{vmatrix} 1 & z_e & z_h \\ 1 & z_{e2} & z_{h2} \\ 1 & z_{e3} & z_{h3} \end{vmatrix}$$

$$L_2 = \frac{1}{2A} \det \begin{vmatrix} 1 & z_{e1} & z_{h1} \\ 1 & z_e & z_h \\ 1 & z_{e3} & z_{h3} \end{vmatrix}$$

$$L_3 = \frac{1}{2A} \det \begin{vmatrix} 1 & z_{e1} & z_{h1} \\ 1 & z_{e2} & z_{h2} \\ 1 & z_e & z_h \end{vmatrix}$$

$$1 = L_1 + L_2 + L_3$$

Elde edilir. Buradan bunların türevleri

$$\frac{\partial L_1}{\partial z_e} = -\frac{(z_{h3} - z_{h2})}{2A}$$

$$\frac{\partial L_1}{\partial z_h} = \frac{(z_{e3} - z_{e2})}{2A}$$

$$\frac{\partial L_2}{\partial z_e} = \frac{(z_{h3} - z_{h1})}{2A}$$

$$\frac{\partial L_2}{\partial z_h} = -\frac{(z_{e3} - z_{e1})}{2A}$$

Elde edilir.

T3 için,

$$N_1 = L_1$$

$$N_2 = L_2$$

$$N_3 = L_3$$

T6 için,

$$N_1 = L_1(L_1 - 1/2).2$$

$$N_2 = L_2(L_2 - 1/2).2$$

$$N_3 = L_3(L_3 - 1/2).2$$

$$N_4 = 4L_1L_2$$

$$N_5 = 4L_2L_3$$

$$N_6 = 4L_1L_3$$

T10 için,

$$N_1 = L_1(L_1 - 1/3).(L_1 - 2/3).\frac{9}{2}$$

$$N_2 = L_2(L_2 - 1/3).(L_2 - 2/3).\frac{9}{2}$$

$$N_3 = L_3(L_3 - 1/3).(L_3 - 2/3).\frac{9}{2}$$

$$N_4 = L_1L_2(L_1 - 1/3)\frac{27}{2}$$

$$N_5 = N_4 = L_1L_2(L_2 - 1/3)\frac{27}{2}$$

$$N_6 = L_2L_3(L_2 - 1/3)\frac{27}{2}$$

$$N_7 = L_2L_3(L_3 - 1/3)\frac{27}{2}$$

$$N_8 = L_1L_3(L_3 - 1/3)\frac{27}{2}$$

$$N_9 = L_1L_3(L_1 - 1/3)\frac{27}{2}$$

$$N_{10} = 27L_1L_2L_3$$

yazılabilir. Bizim hesaplarımızda başlangıçta $L_3 = 1 - L_1 - L_2$ bağ koşulu kullanılmıştır. Bundan dolayı biçim fonksiyonları sadece L_1 ve L_2 bağlı hale gelmiştir.

4.2. Üçgen Global Elementin Biçim Fonksiyonları Kullanılarak Hesaplanan

İntegraller

1. $\bar{\Pi} = \text{sabit matris}$ durumu için;

$$\bar{P}_1 = \iint \left\{ N\bar{I} \right\} \bar{\Pi} \left\{ N\bar{I} \right\}^T dz_e dz_h$$

$$\bar{P}_{2e} = \iint \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_e} \bar{\Pi} \left\{ N\bar{I} \right\}^T dz_e dz_h$$

$$\bar{P}_{3e} = \iint \left\{ N\bar{I} \right\} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_e} dz_e dz_h$$

$$\bar{P}_{4e} = \iint \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_e} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_e} dz_e dz_h,$$

$$\bar{P}_{2h} = \iint \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_h} \bar{\Pi} \left\{ N\bar{I} \right\}^T dz_e dz_h$$

$$\bar{P}_{3h} = \iint \left\{ N\bar{I} \right\} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_h} dz_e dz_h$$

$$\bar{P}_{4h} = \iint \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_h} \bar{\Pi} \frac{\partial \left\{ N\bar{I} \right\}}{\partial z_h} dz_e dz_h$$

integrallerini hesaplamak istiyoruz. N_g global elementteki nod sayısı (3,6,10,15...), N_e element sayısı, N_c çiftlenimli band sayısıdır. Bu integralleri hesaplarken “Kronecker” çarpımından (dış çarpım) yararlanılır. Bu çarpım \otimes sembolü ile temsil edilir.

$$\left\{ N\bar{I} \right\}^T = \left(N_1\bar{I}, N_2\bar{I}, N_3\bar{I}, \dots, N_{N_g}\bar{I} \right)_{N_c \times (N_g \cdot N_c)}$$

$$\bar{\Pi} = \left(\bar{\Pi} \right)_{N_c \times N_c}$$

$$\left\{ N\bar{I} \right\} = \begin{pmatrix} N_1\bar{I} \\ N_2\bar{I} \\ \vdots \\ N_{N_g}\bar{I} \end{pmatrix}_{(N_g \cdot N_c) \times N_c}$$

$$\bar{\bar{\Pi}} \cdot \{N\bar{I}\}^T = \begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \cdots & \Pi_{1N_c} \\ \Pi_{21} & \Pi_{22} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \Pi_{N_c 1} & \cdots & \cdots & \Pi_{N_c N_c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & \cdots & N_{N_g} & 0 \\ 0 & N_1 & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ 0 & & & 0 & & & & & \\ & & & & N_1 & 0 & & & \\ & & & & & & N_2 & \cdots & 0 \\ & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & N_{N_g} \end{bmatrix}_{N_c \times (N_g \cdot N_c)}$$

$$\bar{\bar{\Pi}} \cdot \{N\bar{I}\}^T = \begin{bmatrix} \Pi_{11} N_1 & \Pi_{12} N_1 & \cdots & \Pi_{1N_c} N_1 \\ \Pi_{21} N_1 & \Pi_{22} N_1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \Pi_{N_c 1} N_1 & \cdots & \cdots & \Pi_{N_c N_c} N_1 \end{bmatrix}, N_2 \bar{\bar{\Pi}}, N_3 \bar{\bar{\Pi}}, \dots, N_{N_g} \bar{\bar{\Pi}}$$

$$\bar{\bar{\Pi}} \cdot \{N\bar{I}\}^T = (N_1 \bar{\bar{\Pi}}, N_2 \bar{\bar{\Pi}}, N_3 \bar{\bar{\Pi}}, \dots, N_{N_g} \bar{\bar{\Pi}})$$

$$\{N\bar{I}\} \bar{\bar{\Pi}} \cdot \{N\bar{I}\}^T = \begin{pmatrix} N_1 \bar{I} \\ N_2 \bar{I} \\ \vdots \\ N_{N_g} \bar{I} \end{pmatrix} (N_1 \bar{\bar{\Pi}}, N_2 \bar{\bar{\Pi}}, N_3 \bar{\bar{\Pi}}, \dots, N_{N_g} \bar{\bar{\Pi}})$$

$$\{N\bar{I}\} \bar{\bar{\Pi}} \cdot \{N\bar{I}\}^T = \begin{bmatrix} N_1^2 \bar{\bar{\Pi}} & N_1 N_2 \bar{\bar{\Pi}} & \cdots & N_1 N_{N_g} \bar{\bar{\Pi}} \\ N_2 N_1 \bar{\bar{\Pi}} & N_2^2 \bar{\bar{\Pi}} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ N_{N_g} N_1 \bar{\bar{\Pi}} & \cdots & \cdots & N_{N_g}^2 \bar{\bar{\Pi}} \end{bmatrix} = (\{N\} \{N\}^T) \otimes \bar{\bar{\Pi}}$$

Buradan,

$$\begin{aligned} \bar{\bar{P}}_1 &= \iint dz_e dz_h \{N\bar{I}\} \bar{\bar{\Pi}} \{N\bar{I}\}^T \\ &= \iint dz_e dz_h (\{N\} \{N\}^T) \otimes \bar{\bar{\Pi}} \\ &= \left(\iint dz_e dz_h \{N\} \{N\}^T \right) \otimes \bar{\bar{\Pi}} \end{aligned}$$

$$dz_e dz_h = J dL_1 dL_2$$

$$\iint dz_e dz_h \{N\} \{N\}^T = J \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 \{N\} \{N\}^T = J \bar{\bar{m}}_1$$

$$\left(\bar{\bar{m}}_1 \right)_{ij} = \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_i N_j$$

$$\bar{\bar{P}}_1 = J \left(\bar{\bar{m}}_1 \otimes \bar{\bar{\Pi}} \right)$$

$$\overline{\overline{P}}_{2e} = \iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\overline{I}\}}{\partial z_e} \overline{\overline{\Pi}} \{N\overline{I}\}^T$$

$$\overline{\overline{P}}_{2e} = \left(\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_e} \{N\}^T \right) \otimes \overline{\overline{\Pi}}$$

$$\frac{\partial \{N\}}{\partial z_e} = \left\{ \left\{ \frac{\partial N}{\partial L} \right\} \right\} \frac{\partial \{L\}}{\partial z_e}$$

$$\left\{ \left\{ \frac{\partial N}{\partial L} \right\} \right\}_{ij} = \frac{\partial N_i}{\partial L_j} \quad i = 1, 2, \dots, N_g; j = 1, 2; \text{ burada } j \text{ iki boyutlu FEM yapıldığından } 3' \text{e}$$

kadar gider. Fakat, $L_1+L_2+L_3=1$ bağ koşulu kullanılırsa L_3 , L_1 ve L_2 ye bağlı yazılabileceğinden yukarıdaki j indisi 2'ye kadar alındı.

$$\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_e} \{N\}^T = J \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_e} \right) \overline{\overline{m}}_2(k)$$

$$\left(\overline{\overline{m}}_2(k) \right)_{ij} = \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 \frac{\partial N_i}{\partial L_k} N_j$$

$$\overline{\overline{m}}_{2e} = \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_e} \right) \overline{\overline{m}}_2(k)$$

$$\overline{\overline{P}}_{2e} = J \left(\overline{\overline{m}}_{2e} \otimes \overline{\overline{\Pi}} \right)$$

$$\overline{\overline{P}}_{3e} = \iint dz_e dz_h \{N\overline{I}\} \overline{\overline{\Pi}} \frac{\partial \{N\overline{I}\}}{\partial z_e}^T$$

$$\overline{\overline{P}}_{3e} = \left(\iint dz_e dz_h \{N\} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_e} \right) \otimes \overline{\overline{\Pi}}$$

$$\iint dz_e dz_h \{N\} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_e} = J \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_e} \right) \overline{\overline{m}}_2(k)^T$$

$$\left(\overline{\overline{m}}_2(k)^T \right)_{ij} = \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_i \frac{\partial N_j}{\partial L_k}$$

$$\overline{\overline{m}}_{2e}^T = \sum_{k=1}^2 \frac{\partial L_k}{\partial z_e} \overline{\overline{m}}_2(k)^T$$

$$\overline{\overline{P}}_{3e} = J \left(\overline{\overline{m}}_{2e}^T \otimes \overline{\overline{\Pi}} \right)$$

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{P}}_{4e} &= \iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\bar{I}\}}{\partial z_e} \overline{\overline{\Pi}} \frac{\partial \{N\bar{I}\}^T}{\partial z_e} \\
\overline{\overline{P}}_{4e} &= \left(\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_e} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_e} \right) \otimes \overline{\overline{\Pi}} \\
\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_e} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_e} &= J \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_e} \right) \left(\frac{\partial L_\ell}{\partial z_e} \right) \overline{\overline{m}}_3(k, \ell) \\
\left(\overline{\overline{m}}_3(k, \ell) \right)_{ij} &= \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 \frac{\partial N_i}{\partial L_k} \frac{\partial N_j}{\partial L_\ell} \\
\overline{\overline{m}}_{3e} &= \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_e} \right) \left(\frac{\partial L_\ell}{\partial z_e} \right) \overline{\overline{m}}_3(k, \ell) \\
\overline{\overline{P}}_{4e} &= J \left(\overline{\overline{m}}_{3e} \otimes \overline{\overline{\Pi}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{P}}_{2h} &= \iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\bar{I}\}}{\partial z_h} \overline{\overline{\Pi}} \{N\bar{I}\}^T \\
\overline{\overline{P}}_{2h} &= \left(\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_h} \{N\}^T \right) \otimes \overline{\overline{\Pi}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \{N\}}{\partial z_h} &= \left\{ \left\{ \frac{\partial N}{\partial L} \right\} \right\} \frac{\partial \{L\}}{\partial z_h} \\
\left\{ \left\{ \frac{\partial N}{\partial L} \right\} \right\}_{ij} &= \frac{\partial N_i}{\partial L_j} \quad i = 1, 2, \dots, N_g; j = 1, 2; \text{ burada } j \text{ iki boyutlu FEM yapıldığından } 3 \text{'e}
\end{aligned}$$

kadar gider. Fakat, $L_1+L_2+L_3=1$ bağ koşulu kullanılırsa L_3 , L_1 ve L_2 ye bağlı yazılabileceğinden yukarıdaki j indisi 2'ye kadar alındı.

$$\begin{aligned}
\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_h} \{N\}^T &= J \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_h} \right) \overline{\overline{m}}_2(k) \\
\left(\overline{\overline{m}}_2(k) \right)_{ij} &= \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 \frac{\partial N_i}{\partial L_k} N_j \\
\overline{\overline{m}}_{2h} &= \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_h} \right) \overline{\overline{m}}_2(k) \\
\overline{\overline{P}}_{2h} &= J \left(\overline{\overline{m}}_{2h} \otimes \overline{\overline{\Pi}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{P}}_{3h} &= \iint dz_e dz_h \{N\overline{I}\} \overline{\overline{\Pi}} \frac{\partial \{N\overline{I}\}^T}{\partial z_h} \\
\overline{\overline{P}}_{3h} &= \left(\iint dz_e dz_h \{N\} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_h} \right) \otimes \overline{\overline{\Pi}} \\
\iint dz_e dz_h \{N\} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_h} &= J \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_h} \right) \overline{\overline{m}}_2(k)^T \\
\left(\overline{\overline{m}}_2(k)^T \right)_{ij} &= \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_i \frac{\partial N_j}{\partial L_k} \\
\overline{\overline{m}}_{2h}^T &= \sum_{k=1}^2 \frac{\partial L_k}{\partial z_h} \overline{\overline{m}}_2(k)^T \\
\overline{\overline{P}}_{3h} &= J \left(\overline{\overline{m}}_{2h}^T \otimes \overline{\overline{\Pi}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{P}}_{4h} &= \iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\overline{I}\}}{\partial z_h} \overline{\overline{\Pi}} \frac{\partial \{N\overline{I}\}^T}{\partial z_h} \\
\overline{\overline{P}}_{4h} &= \left(\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_h} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_h} \right) \otimes \overline{\overline{\Pi}} \\
\iint dz_e dz_h \frac{\partial \{N\}}{\partial z_h} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z_h} &= J \sum_{\substack{k=1 \\ \ell=1}}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_h} \right) \left(\frac{\partial L_\ell}{\partial z_h} \right) \overline{\overline{m}}_3(k, \ell) \\
\left(\overline{\overline{m}}_3(k, \ell) \right)_{ij} &= \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 \frac{\partial N_i}{\partial L_k} \frac{\partial N_j}{\partial L_\ell} \\
\overline{\overline{m}}_{3h} &= \sum_{\substack{k=1 \\ \ell=1}}^2 \left(\frac{\partial L_k}{\partial z_h} \right) \left(\frac{\partial L_\ell}{\partial z_h} \right) \overline{\overline{m}}_3(k, \ell) \\
\overline{\overline{P}}_{4h} &= J \left(\overline{\overline{m}}_{3h} \otimes \overline{\overline{\Pi}} \right)
\end{aligned}$$

2. $\bar{\bar{\Pi}} = \bar{\bar{\Pi}}(z_e, z_h)$ deęişkenlerine baęlı bir fonksiyonu olma durumunda ise,

$$\begin{aligned} \bar{P}_0 &= \iint dz_e dz_h \left\{ N \bar{I} \right\} \bar{\bar{\Pi}} \left\{ N \bar{I} \right\}^T \\ \bar{\bar{\Pi}} &= \sum_{k=1}^{Ng} \bar{\bar{\Pi}}(k) N_i(L) \\ \bar{P}_0 &= \sum_{k=1}^{Ng} J \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_k(L) \left\{ N \bar{I} \right\} \bar{\bar{\Pi}}(k) \left\{ N \bar{I} \right\}^T \\ \bar{P}_0 &= J \sum_{k=1}^{Ng} \left[\left(\int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_k(L) \left\{ N \right\} \left\{ N \right\}^T \right) \otimes \bar{\bar{\Pi}}(k) \right] \\ \overline{\overline{m_0(k)}} &= \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_k(L) \left\{ N \right\} \left\{ N \right\}^T \\ \left(\overline{\overline{m_0(k)}} \right)_{ij} &= \int_0^1 dL_1 \int_0^{1-L_1} dL_2 N_k(L) N_i(L) N_j(L) \\ \bar{P}_0 &= J \sum_{k=1}^{Ng} \left(\overline{\overline{m_0(k)}} \otimes \bar{\bar{\Pi}}(k) \right) \end{aligned}$$

elde edilir.

EK-5

“ZİNC-BLENDE” DURUMU İÇİN KİNETİK ENERJİ MATRİSLERİ

$$h_{C,ij} \left(\left| \vec{k}_t \right|, k_{z_e} \right) = h_{C,ij}^{(0)} \cdot k_{z_e}^2 + h_{C,ij}^{(1)} \cdot k_t \cdot k_{z_e} + h_{C,ij}^{(2)} \cdot k_t^2 + h_{C\phi,ij}^{edge}$$

$$h_{V,ij} \left(\left| \vec{k}_t \right|, k_{z_h} \right) = h_{V,ij}^{(0)} \cdot k_{z_h}^2 + h_{V,ij}^{(1)} \cdot k_t \cdot k_{z_h} + h_{V,ij}^{(2)} \cdot k_t^2 + h_{V\phi,ij}^{edge}$$

$$h_{C,ij} \left(\left| \vec{k}_t \right|, k_{z_e} \right) = \left(\frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_e(z_e)} + \frac{\hbar^2 k_{z_e}^2}{2m_e(z_e)} + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \right) \bar{I}$$

$$h_{C,ij}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m_e(z_e)}, \quad h_{C,ij}^{(1)} = 0, \quad h_{C,ij}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m_e(z_e)}, \quad h_{C\phi,ij}^{edge} = a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

Not: İzotropik bir iletkenlik bandı olduğu varsayıldı.

$$h_{V,ij} \left(\left| \vec{k}_t \right|, k_{z_h} \right) = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^+ & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix}$$

$$P = P_k + P_\varepsilon \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon$$

$$R = R_k + R_\varepsilon \quad S = S_k + S_\varepsilon$$

$$P_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_t^2 + k_{z_h}^2) \quad P_\varepsilon = -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

$$Q_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_t^2 - 2k_{z_h}^2) \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$R_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} k_t^2 (-\gamma_2 (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) + 2i\gamma_3 \cdot \cos \phi \cdot \sin \phi)$$

$$R_\varepsilon = \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy}$$

$$S_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2\sqrt{3}\gamma_3 (\cos\phi - i\sin\phi) k_x k_z \quad S_\varepsilon = -d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz})$$

$$h_{V,ij}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\gamma_1 + 2\gamma_2) & 0 & 0 & 2\sqrt{2}\gamma_2 & 0 \\ 0 & 0 & (\gamma_1 + 2\gamma_2) & 0 & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2 \\ 0 & 0 & 0 & (\gamma_1 - 2\gamma_2) & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2}\gamma_2 & 0 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & -2\sqrt{2}\gamma_2 & 0 & 0 & \gamma_1 \end{bmatrix}$$

$$h_{V,ij}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} 0 & -2\sqrt{3}\gamma_3 e^{-i\phi} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{-i\phi} & 0 \\ -2\sqrt{3}\gamma_3 e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{-i\phi} \\ 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{-i\phi} & \sqrt{\frac{3}{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{i\phi} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{i\phi} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{i\phi} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{-i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{i\phi} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} 2\sqrt{3}\gamma_3 e^{-i\phi} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$h_{V,ij}^{(2)} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} (\gamma_1 + \gamma_2) & 0 & \sqrt{3}(-\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) & 0 & 0 & \sqrt{6}(-\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) \\ 0 & (\gamma_1 - \gamma_2) & 0 & \sqrt{3}(-\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) & -\sqrt{2}\gamma_2 & 0 \\ -\sqrt{3}(\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) & 0 & (\gamma_1 - \gamma_2) & 0 & 0 & \sqrt{2}\gamma_2 \\ 0 & -\sqrt{3}(\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) & 0 & (\gamma_1 + \gamma_2) & \sqrt{6}(\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}\gamma_2 & 0 & \sqrt{6}(\gamma_2 \cos 2\phi - i\gamma_3 \sin 2\phi) & \gamma_1 & 0 \\ -\sqrt{6}(\gamma_2 \cos 2\phi + i\gamma_3 \sin 2\phi) & 0 & -\sqrt{2}\gamma_2 & 0 & 0 & \gamma_1 \end{bmatrix}$$

$$h_{V,ij}^{edge} = - \begin{bmatrix} P_\varepsilon + Q_\varepsilon & -S_\varepsilon & R_\varepsilon & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} S_\varepsilon & \sqrt{2} R_\varepsilon \\ -S_\varepsilon^\dagger & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & R_\varepsilon & -\sqrt{2} Q_\varepsilon & \sqrt{\frac{3}{2}} S_\varepsilon \\ R_\varepsilon^\dagger & 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & S_\varepsilon & \sqrt{\frac{3}{2}} S_\varepsilon^\dagger & \sqrt{2} Q_\varepsilon \\ 0 & R_\varepsilon^\dagger & S_\varepsilon^\dagger & P_\varepsilon + Q_\varepsilon & -\sqrt{2} R_\varepsilon^\dagger & -\frac{1}{\sqrt{2}} S_\varepsilon^\dagger \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} S_\varepsilon^\dagger & -\sqrt{2} Q_\varepsilon & \sqrt{\frac{3}{2}} S_\varepsilon & -\sqrt{2} R_\varepsilon & P_\varepsilon + \Delta & 0 \\ \sqrt{2} R_\varepsilon^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}} S_\varepsilon^\dagger & \sqrt{2} Q_\varepsilon & -\frac{1}{\sqrt{2}} S_\varepsilon & 0 & P_\varepsilon + \Delta \end{bmatrix}$$

Not: Valans bandı için eksen yaklaşımı (Axial approximation) yapılmadan 6x6'lık Luttinger-Kohn Hamiltonianı göz önüne alındı.

EK-6
“KRONECKER” ÇARPIMI

Matematikte “Kronecker” çarpımı \otimes simgesiyle gösterilir. Bu çarpım farklı büyüklükteki iki matris arasında yapılır ve sonuçta bir matris elde edilir. Tensör çarpımının özel bir durumudur.

Tanım: Eğer A $m \times n$ 'lik bir matris ve B $p \times q$ 'luk bir matris ise, o zaman $A \otimes B$ Kronecker çarpımını $mp \times nq$ 'luk bir matristir.

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

Daha açık yazılmak istenirse,

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & \cdots & a_{11}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{11}b_{p1} & \cdots & a_{11}b_{pq} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{pq} \\ a_{21}b_{11} & \cdots & a_{21}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{2n}b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ a_{m1}b_{11} & \cdots & a_{m1}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{p1} & \cdots & a_{m1}b_{pq} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{pq} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{11}b_{13} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{12}b_{13} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{11}b_{23} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{12}b_{23} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{21}b_{13} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{22}b_{13} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{21}b_{23} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{22}b_{23} \\ a_{31}b_{11} & a_{31}b_{12} & a_{31}b_{13} & a_{32}b_{11} & a_{32}b_{12} & a_{32}b_{13} \\ a_{31}b_{21} & a_{31}b_{22} & a_{31}b_{23} & a_{32}b_{21} & a_{32}b_{22} & a_{32}b_{23} \end{bmatrix}$$

olur.

Özellikleri: k skaler, A , B ve C matris olmak üzere,

$$\begin{aligned} A \otimes (B + C) &= A \otimes B + A \otimes C \\ (A + B) \otimes C &= A \otimes C + B \otimes C \\ (kA) \otimes B &= A \otimes (kB) = k(A \otimes B) \\ (A \otimes B) \otimes C &= A \otimes (B \otimes C) \\ (A \otimes B)^{-1} &= A^{-1} \otimes B^{-1} \\ (A \otimes B)^T &= A^T \otimes B^T \end{aligned}$$

dir. Ayrıca “Kronecker” çarpımı komütatif değildir. Genelde $A \otimes B$ ile $B \otimes A$ farklı matrislerdir.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Metin GÜNEŞ
Doğum Yeri ve Yılı : Mestanlı/Bulgaristan - 22.05.1977
Medeni Hali : Evli
İş Adresi : Cumhuriyet Üniversitesi, Fen–Edebiyat Fakültesi,
Fizik Bölümü, 58140 Sivas/Türkiye.
İş Telefonu : 0 (346) 219 10 10 – 2160
e-mail : mgunes@cumhuriyet.edu.tr

Öğrenim Durumu:

1983-1989: “Nikola Yonkov Vapsarov” İlköğretim Okulu,
Mestanlı/Bulgaristan
1989-1991: Sivas Selçuk Ortaokulu
1991-1995: Sivas Merkez Endüstri Meslek ve Teknik Lisesi,
Motor Bölümü
1995-1999: C. Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü (Lisans)
1999-2002: C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Katıhal Fiziği
Anabilim Dalı (Yüksek Lisans)
Tez Konusu: Bir Boyutlu Sistemlerde Eksitonlar
2002- 2009: C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Katıhal Fiziği
Anabilim Dalı (Doktora).
Tez Konusu: Hidrostatik Basınç Altında Düşük Boyutlu
Yarıiletken Sistemlerin Elektronik Ve Optik Özellikleri

Akademik Görevler:

2000- ... : C. Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü,
Araştırma Görevlisi

Katıldığı Bilimsel Toplantılar:

- 1- “Çiftlenimli Kuantum Tellerinde Elektronik ve Eksitonik Yapı”,
M. Güneş, E. Kasapoğlu, H. Sarı and İ. Sökmen, 8. Yoğun Madde
Fiziği Ankara Toplantısı, 9 Kasım 2001, Bilkent Üniversitesi,
ANKARA.

- 2- “Yoğun Laser Alanı Altında Yarıiletkenlerdeki Optik Geçişler”, M. Güneş, H. Sarı, E. Kasapoğlu and İ. Sökmen, 10. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, 14 Kasım 2003, Hacettepe Üniversitesi, Beytepe/ANKARA.
- 3- “The Effect of Hydrostatic Pressure on Optical Transitions in Quantum Well Wires”, M.Güneş, E. Kasapoğlu, H.Sarı, İ.Sökmen, International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nano Devices, 30 Temmuz - 4 Ağustos 2006, İstanbul.
- 4- “Elektrik Alan Altındaki Tek Kuantum Kuyusunun Valans Bant Yapısının Sonlu Elemanlar Yöntemi İle Analizi”, M.Güneş, E. Kasapoğlu, K. Akgüngör, H.Sarı, İ.Sökmen, 14. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, 2 Kasım 2007, Hacettepe Üniversitesi Beytepe/ANKARA.

Yayımlar:

1. E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sökmen and **M. Güneş**, “ Optical Transitions in Quantum Well Wires under Intense Laser Radiation, Physics Letters A 319, 211-216 (2003).
2. E. Kasapoglu, **M. Güneş**, H. Sari and I. Sökmen, “Barrier Thickness Dependence of Optical Absorption of Excitons in GaAs Coupled Quantum Wire”, Surface Review and Letters 11, 49-55 (2004).
3. E. Kasapoglu, H. Sari, **M. Güneş** and I. Sökmen "Magnetic Field and Intense Laser Radiation Effects on the Interband Transitions in Quantum Well Wires", Surface Review and Letters 11, 403-409 (2004).
4. E. Kasapoglu, H. Sari, **M. Güneş** and I. Sökmen “The Effect of Hydrostatic Pressure on Optical Transitions in Quantum Well Wires”, Physica B 353, 345–350, (2004).
5. E. Kasapoğlu, **M.Güneş** and İ.Sökmen, “Effect of Hydrostatic Pressure on Interband Transitions in Coupled Quantum Wires”, Chin. Phys. Lett., Vol 24. No. 4, 1058 (2007).

Projeler:

1. "Bir Boyutlu Sistemlerde Eksitonlar" , Cumhuriyet Üniversitesi Araştırma Fon Saymanlığı, (F-101), Yardımcı Araştırmacı, 2002.
2. "Hidrostatik Basınç Altında Düşük Boyutlu Yarıiletken Sistemlerin Elektronik ve Optik Özellikleri", CÜBAP, (F-172), Yardımcı Araştırmacı, 2009.