

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ÇİFT PARABOLİK KUŞATMA ALTINDA KUANTUM SİSTEMİ EKSİTONİK BAĞLANMA ENERJİLERİ

Songül KUTLU

Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Ağustos-2007

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Rana AMCA

Bu çalışmada GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs kuantum teli üzerine manyetik alan uygulanması ile sistemde oluşturulan parabolik kuşatmaya ek olarak uzaysal kuşatma da parabolik seçilerek ikincil bir parabolik kuşatma etkisi yaratılmış ve oluşan sistemin simetrisi hiç bozulmadan bir elektron ve boşluğun (holün) bağlanma enerjileri hesaplanmıştır.

ANAHTAR KELİMELER: Kuantum Teli; Çift Parabolik Kuşatma; Eksiton

SUMMARY

MSc Thesis

**IN THE PRESENCE OF DOUBLE PARABOLIC SURROUNDING QUANTUM
SYSTEM EXCITON BINDING ENERGIES**

Songül KUTLU

Cumhuriyet University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

August-2007

Supervisor: Yrd. Doç Dr. Rana AMCA

In this study, we have calculated the binding energies of an electron and hole in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum wire under the effect of double parabola; one from the applied magnetic field and other from the chosen spatial confinement without breaking the symmetry

KEY WORDS: Quantum Wire; Double Parabolic Surrounding ;Exciton

İÇİNDEKİLER

içindekiler.....	I
Şekiller	II
1 GİRİŞ	1
1.1 Hemen Hemen Serbest Elektron Modeli ve Enerji Bantları	4
1.2 Etkin Kütle Yaklaşımı	9
1.3 Saf Yarıiletkenler	13
1.4 Katkılı Yarıiletkenler	14
1.5 Yarıiletkenlerde Optik Süreçler	15
1.6 Heteroyapılar	18
1.7 Eksitonlar	22
1.8 Eksiton Türleri	24
1.8.1 Wannier-Mott eksitonları	24
1.8.2 Frenkel eksitonları	26
1.9 Nanoyapılar: kuantum kuyu, telleri ve noktaları	27
2 YÖNTEM VE TEKNİKLER	32
2.1 Düz Çift Parabolik Kuşatmada Elektronik Enerji Düzeyleri	32
2.2 Düz Çift Parabolik Kuşatmada Eksiton Bağlanma Enerjileri	37
3 BULGULAR	43
3.1 Manyetik Alanın Bağlanma Enerjileri Üzerine Etkileri	44
3.1.1 $x=0.2$ için veriler	44
3.1.2 $x=0.4$ için veriler	48
3.2 Kuyu Yarıçapının Bağlanma Enerjileri Üzerine Etkileri	52
3.2.1 $x=0.2$ için veriler	52
3.2.2 $x=0.4$ için veriler	54
4 TARTIŞMA VE SONUÇ	56
5 KAYNAKLAR	57
6 ÖZGEÇMİŞ	58
7 EKLER	59

ŞEKİLLER

Şekil 1: $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusu . (a) Çok ince, dar bant aralıklı bir GaAs tabakası, iki kalın ve daha geniş bant aralıklı $Al_xGa_{1-x}As$ tabakaları arasına yerleştirilmiştir. (b) Elektronlar sonlu bir kare kuyu potansiyeli ile ince GaAs tabakasında tuzaklanmaktadır. _____	2
Şekil 2: Bir enerji düzeyinin yarılmaması. _____	6
Şekil 3: Si kristalinde tek bir elektronun enerji düzeyleri. _____	7
Şekil 4: (a) Serbest uzayda elektron. (b) kristal içerisinde bir elektron. _____	10
Şekil 5: İletim bandı. _____	11
Şekil 7: (a) Doğrudan bant yapısına sahip bir yarıiletkende rekombinasyon olayı. (b) dolaylı bant yapısına sahip yarıiletkende rekombinasyon olayı. _____	17
Şekil 8: Enerji diyagramı (a) bir homoeklem, (b) bir heteroeklem _____	18
Şekil 9: Yarıiletken bir kristalin enerji diyagramı. (a) değişken katkı, sabit enerji bandı. (b) katkı yok, değişken enerji bandı. _____	19
Şekil 10: HEMT temel yapısı. _____	20
Şekil 11: Heteroyapı tipleri _____	21
Şekil 12: Eksiton enerji düzeyleri _____	22
Şekil 13: Wannier Eksitonu. Bağlanma enerjisi $\approx 10meV$, yarıçapı $100A^\circ$ _____	24
Şekil 14: Frenkel eksitonu. Bağlanma enerjisi $\approx 1eV$, yarıçapı $10A^\circ$. _____	26
Şekil 15: Düşük boyutlu yapılar. _____	27
_____ Şekil 16: Kuantum kuyu profili _____	28
Şekil 17: Parabolik uzaysal kuşatma. (a) manyetik alan yok (b) düşük manyetik alan (c) yüksek manyetik alan _____	30
Şekil 18: Silindirik kuantum telinin şematik gösterimi _____	32
Şekil 20: $x = 0.2$ için a_B yarıçaplı telde eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi. _____	45
Şekil 21: Şekil 20 de oklarla gösterilen noktalar için olasılık yoğunluğu ve kuyu profili. _____	46
Şekil 22: $x = 0.4$ için eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alanla değişimi. _____	48
Şekil 23: $x = 0.4$ için a_B yarıçaplı telde eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi. _____	49
Şekil 24: Şekil 23 de oklarla gösterilen noktalar için olasılık yoğunluğu ve kuyu profili. _____	50
Şekil 25: $x = 0.2$ için eksiton bağlanma enerjisinin tel yarıçapı ile değişimi. _____	52
Şekil 26: Şekil 25 te oklarla gösterilen noktalar için olasılık yoğunluğu ve kuyu profili ($B=100KG$). (a) $r= 0.5a_B$ (b) $r=1.5a_B$ ve (c) $r=2a_B$ _____	53
Şekil 27: $x = 0.4$ ve $x=0.2$ için eksiton bağlanma enerjisinin tel yarıçapı ile değişimi. _____	55

Şekil 28: (a) Elektron olasılık fonksiyonu ve kuyu profili. (b) Hol olasılık fonksiyonu ve kuyu profili.

55

1 GİRİŞ

Son yıllarda katıhal fiziğinin uygulamaları dramatik bir gelişme göstermiştir ve de hızla gelişmeye devam etmektedir. Bu uygulamalar, sanayideki geniş kullanım alanlarından dolayı, bir çok araştırmaya konu olmuş yarıiletkenler üzerinedir [1]. Diyot, transistör, entegre, laser, güneş pili (solarcell) gibi pek çok elektronik ve opto-elektronik devre elemanı yapımında yarıiletkenler kullanılır. Bu tip devre elemanları, direk bakır kablo gibi saf iletken ya da plastik gibi elektriksel yalıtkanlıkları olan maddeler yerine belli durumlarda iletme izin veren maddelerden yapılabilir. Örneğin bir diyot bir yönde akıma izin verirken diğer yönde akım geçirmez. Bu da bir yönde iletken, diğer yönde yalıtkan davranışı gerektirir. Böyle bir aygıt için ne saf bir iletken ne de yalıtkan kullanılabilir.

Yarıiletkenin iletkenliğinin kontrol edilebilir olması tercih sebebidir. Ancak yarıiletkenler tabiatta buldukları halleri ile kullanılamazlar, devre yapımından önce gerekli fiziksel ve kimyasal işlemlerden geçerler. İletkenliklerini artırmak için bilinçli olarak katkılanabilir, laboratuvar ortamında bileşik eleman halinde elde edilebilir ve tabakaların boyutları değiştirilip yeni özellikler kazandırılabilir. Daha önemlisi saflaştırılan kristaller model (alttaş) alınarak üzerine alttaki kristal yapısını taklit ederek büyüyen, istenilen nitelikte yeni yarıiletkenler yetiştirilebilir. Bu işleme ‘epitaksi’ denir. Bunu mümkün kılan kristal yetiştirme teknikleri günümüzde oldukça gelişmiştir. Sıvı faz epitaksi (LPE), buhar faz epitaksi (VPE), metal organik kimyasal buharla biriktirme (MOCVD) ve moleküler ışın epitaksi (MBE) bu tekniklerin temelini oluştururlar.

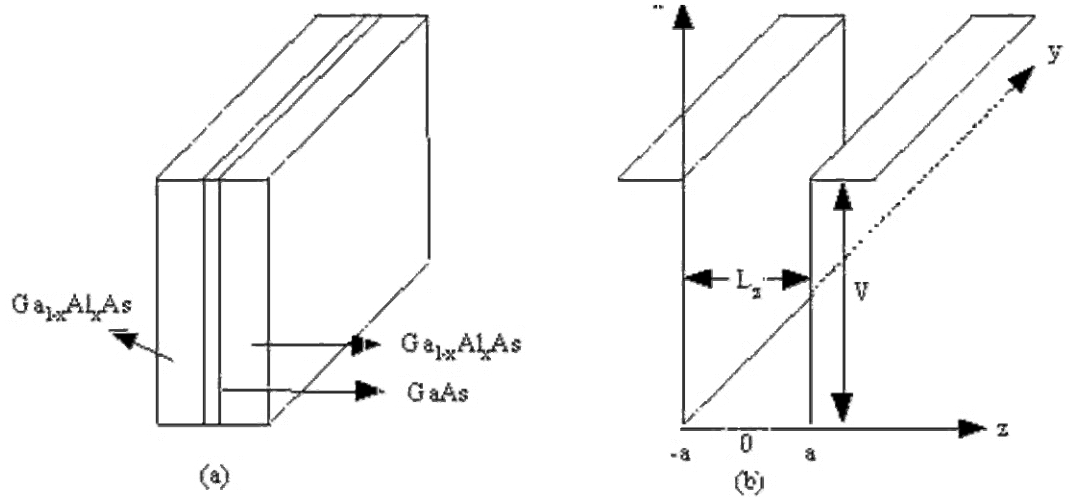
Yoğun madde fiziğindeki araştırmaların düşük boyutlu sistemler üzerinde yoğunlaşması şaşırtıcı değildir. Kristal büyüme tekniklerindeki gelişmeler araştırmaların deneysel olarak üç boyuttan iki, bir, sıfır boyutlu sistemlere kadar gerçekleşmesini mümkün kılmıştır. Düşük boyutlarda çalışılmasının temel nedeni, materyalin boyutlarının de Broglie dalga boyu mertebesinde (100Å) olduğunda kuantum etkilerinin görülmesidir [2]. Kuantum etkileri elektronun davranışını değiştirir bu da materyalin elektronik özelliklerini etkiler. Belirli özelliklere sahip bir materyalin elektronik ve optik özellikleri boyutları küçültülerek değiştirilebilir, yeni özellikler kazandırılabilir. Düşük boyutlu yapılar kuantum kuyuları (QW), telleri (QWs) noktaları (QD) olup, sırasıyla elektronun hareket yönündeki kısıtlamaların artışıyla oluştururlar. Burada kısıtlamak ile vurgulanan boyutun de Broglie dalga boyu mertebesinde küçültülmesidir. Kısıtlanmamış bir katıda elektron (ya da boşluk) üç yönde de serbesttir. Öyleyse bir yarıiletken tabakası kısıtlanmamışsa serbestlik derecesi sayısı üçtür. Serbestlik derecesi sayısı D_f , kısıtlanmış yön sayısı D_c ile gösterilirse $D_f + D_c = 3$ eşitliği tüm katılar için geçerli olur. Böylece kuantum kuyularında elektron momentumunun kısıtlanmış yön sayısı $D_c = 1$ olduğundan bu yapı “hemen hemen iki boyutlu”, kuantum tellerinde $D_c = 2$ olduğundan yapı “hemen hemen bir boyutlu”,

kuantum noktalarında ise $D_c=3$ olduğundan yapı “hemen hemen sıfır boyutlu” yapı olarak bilinir. Burada yapıların önüne getirilen ‘hemen hemen’ ifadesi aslında sıfır sayılan boyutun de Broglie dalga boyu mertebesinde olup diğer boyutların yanında ihmal edildiğini hatırlatmak içindir. Aşağıdaki tabloda boyutlar ve serbestlik dereceleri gösterilmiştir [3].

Tablo 1: Dört temel sistem için elektron hareketinin serbestlik derecesi sayısı D_f ve kısıtlama yönü sayısı D_c .

Sistem	D_c	D_f
Külçe (katı)	0	3
Kuantum kuyusu	1	2
Kuantum teli	2	1
Kuantum noktası	3	0

Düşük boyutlu yarıiletken yapılar içerisinde üzerinde en çok araştırma yapılmış olan yapılar $GaAs$ ve $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletkenlerinden oluşan heteroyapılardır. Şekil 1(a)' da $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletkenlerinin üst üste yetiştirilmesi ile oluşmuş düşük boyutlu bir yapı gösterilmiştir.



Şekil 1: $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusu . (a) Çok ince, dar bant aralıklı bir $GaAs$ tabakası, iki kalın ve daha geniş bant aralıklı $Al_xGa_{1-x}As$ tabakaları arasında yerleştirilmiştir. (b) Elektronlar sonlu bir kare kuyu potansiyeli ile ince $GaAs$ tabakasında tuzaklanmaktadır.

Burada x parametresi, GaAs malzemesi içine katılan alüminyum (Al) malzemesinin yüzdesini gösterir ve değeri 0 ile 1 arasında değişir. GaAs içine katılan Al, bu malzemelerin iletkenliğini ve enerji-bant yapısını (E_g) etkin bir şekilde değiştirir. Bu değişiklik Şekil 1 (b)'de açık olarak görülmektedir. Al, içine katıldığı malzemenin enerji-bant yapısını değiştirmektedir. Al malzemesinin yarıiletkenlere kazandırdığı bu özellik, ileri teknolojik malzeme üretiminde vazgeçilmez bir özellik olarak ortaya çıkmaktadır. Bu nedenle de literatürde bu konuda birçok çalışma yapılmıştır. Bu çalışmalarda izlenen yol açıktır. Hangi aygıt ya da özellik tasarlanıyor ise buna uygun potansiyel profili oluşturulur. Potansiyel profili, üstte bahsettiğimiz tekniklerle yetiştirilir ve buna ek olarak manyetik alan, elektrik alan ya da hidrostatik basınç gibi dış etkilerle amaca uygun biçime getirilir. Bu şekilde yapılan çok sayıda çalışmanın tümünü burada belirtmek mümkün değil ancak birkaç örnek gösterilebilir. E. Kasapoğlu ve diğerleri tarafından hidrostatik basıncın *GaAs / AlGaAs* kuantum telinde safsızlık bağlanma enerjileri üzerine etkisi[4], H. Karkı ve diğerleri tarafından manyetik alanın *GaAs / AlGaAs* silindirik kuantum kuyu telinde bağlı elektronik enerji düzeyleri üzerine etkisi çalışılmıştır[5]. Villamil, Cabra ve N.Porras-Montenegro silindirik *GaAs / AlGaAs* kuantum kuyu telinde geçiş enerjileri ve safsızlık durumlarının manyetik alan altındaki değişimini[6], Brown ve Spector ise *GaAs / AlGaAs* kuantum kuyu telinde eksiton bağlanma enerjilerini çalışmışlardır[7]. Ayrıca Li, Branis, ve Bajaj, silindirik *GaAs / AlGaAs* kuantum kuyu teline manyetik alan uygulandığında eksiton bağlanma enerjilerindeki değişimleri hesaplamışlardır[8].

Bu tez çalışmasında, kuantum telinin üretilme sırasında parabolik büyütülebileceği bir yapı tasarlanmıştır. Bu yapı *Al* konsantrasyonunun başlangıçtaki sıfır değerinden yüzde kırk oranına kadar kontrollü bir şekilde artırılarak geliştirilmesi mümkün bir yapıdır. Böyle bir yapıda bant süreksizlikleri parabolik bir kuşatma oluşturmuştur (Materyali yetiştirme sırasında oluşturulan kuşatma, uzaysal kuşatma olarak ifade edilir). Bu sisteme yetiştirilme doğrultusunda manyetik alan uygulanarak manyetik alan etkisi ile ikinci bir parabolik kuşatma yaratılmıştır. (Bilindiği gibi hareketli bir yükün hızına dik doğrultuda düzgün bir manyetik uygulanırsa, yük manyetik alana dik olan düzlemde dairesel bir yörüngede hareket eder). Yapının simetrisi hiç bozulmadan, bu yapı içerisinde bir eksitonun bağlanma enerjisinin hesaplanması bu çalışmanın esas konusudur ve literatürde daha önce çalışılmamıştır. Ayrıca aynı yapıda safsızlık bağlanma enerjilerini inceleyen bir tez de yapılmıştır[9]. Son olarak bu çalışmada tasarlanan parabolik kuyunun deneysel olarak büyütülebilmesinin mümkün olduğunu gösteren bir çalışma W. Q. Chen ve diğerleri tarafından yapılmıştır[10].

1.1 Hemen Hemen Serbest Elektron Modeli ve Enerji Bantları

Katıhal fiziğinin çok çeşitli ve güçlü uygulamalarının temelini anahtar bir sorunun cevabı oluşturur. Bu soru, bir katı içerisindeki elektronun elektrik ve manyetik alan gibi bir dış etkiye maruz kaldığında nasıl davrandığıdır. İlk çalışmalarda bir metal içerisindeki elektronun davranışını açıklayabilmek için 'serbest elektron model'i geliştirilmiştir.

Serbest elektron modelinde, metal içerisinde elektronun hiç bir engelle karşılaşmadan istediği her yönde hareket edebildiği varsayılmıştır. Böylece problem, kristal içerisinde, iyonlarla ve diğer elektronlarla etkileşmeyen dolayısıyla da hiçbir potansiyel etkisinde kalmayan, yalnızca kinetik enerjiye sahip tek bir elektron problemine indirgenmiştir. Bir dış etki olmadığı sürece, elektron metalden dışarı kaçamayacağı için bugün metalin iş fonksiyonu olarak bildiğimiz potansiyel, elektronu serbest bulunduğu bir kuyuda sınırlayan sonsuz duvarlar olarak alınmıştır. Elektronun sonsuz bir kuyu içerisinde serbestçe hareket edebilmesi, bir kap içerisindeki gazın davranışı ile aynı görüldüğünden serbest elektronlara elektron gazı da denilmektedir. Modelde, elektron yalnızca kinetik enerjiye sahip olduğundan gazların kinetik teorisindeki sonuçlar, elektronun kinematiği ile ilgili problemlerin çözümünde başarılı olmuştur. Ohm yasası ve termal iletkenlik bunlardan birkaçıdır. Ancak teori yine de yetersiz kalmıştır. Örneğin deney sonuçları yüksek sıcaklıklarda, artan sıcaklıkla metalin iletkenliğinin azaldığını göstermiştir. Serbest elektron teorisi ile bu açıklanamamıştır. Ayrıca teori, düşük sıcaklıklarda öz ısıyı deney sonuçlarıyla karşılaştırıldığında oldukça yanlış tahmin etmiştir. En önemlisi metal, yarıiletken ve yalıtkan arasındaki farkı açıklayamamıştır. Serbest elektron teorisindeki bu yetersizliğin kaynağı teorisinin üzerine kurulduğu öngörülerde yatmaktadır. Teorideki temel kusur, elektrona etki eden kristal potansiyelinin sınırlar haricinde tümüyle ihmal edilmiş olmasından kaynaklanır. Öyleyse kristal potansiyelini de hesaba katan yeni bir teoriye ihtiyaç vardır.

Kristal potansiyeli, kristal içerisindeki bir test elektronunun iyon korları ile etkileşiminden oluşan potansiyel ile diğer iletim elektronları ile etkileşiminden oluşan potansiyellerin toplamıdır. Kristal potansiyelinin hesaplanması istenirse iyon korlarından kaynaklanan potansiyelin hesabı yapılabilir. Ters uzayda kristal örgü noktaları periyodik olduğundan elektron-iyon potansiyelini hesaplanmasında fazla bir sıkıntı ile karşılaşılmaz. Ancak elektron-elektron etkileşiminden kaynaklı potansiyelin hesabında bazı güçlükler açığa çıkar. Çünkü potansiyelin tam olarak hesaplanabilmesi için, test elektronunun etkileştiği diğer tüm iletim elektronlarının durumlarının bilinmesi gereklidir. Ancak bu kez de problem çok parçacık problemine dönüşür. Bu güçlükleri aşmak için elektron-elektron etkileşimi zayıf olduğu için örgü potansiyeli yanında ihmal edilmiştir.

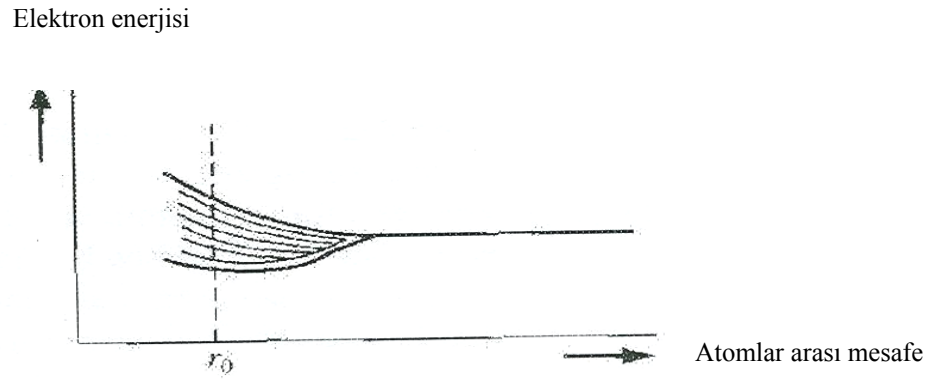
Bir katı içerisinde elektronun enerji düzeylerini elektron-iyon etkileşimini de hesaba katarak tanımlayan bu yeni model 'hemen hemen serbest elektron modeli' dir ve yasak ve serbest enerji bantları kavramını açıklar. Yasak ve serbest enerji bantları yarıiletken fiziğinin önemli bir kavramıdır ve metal, yalıtkan ve yarıiletkenlerin elektriksel karakteristiklerinin arasındaki farklılıkları açıklayabilmektedir.

Akım, katı içerisindeki sürekli yük akışı olduğundan elektrik alan gibi bir dış kuvvet kristale uygulandığında elektronun tepkisini belirlemek önemlidir. Bildiğimiz gibi elektronun örgü içerisindeki hareketi serbest uzaydakinden farklıdır. (bkz. Etkin Kütle Kavramı) Yarıiletken içerisinde çok sayıda elektron bulunduğundan, her bir parçacığın hareketini takip etmek imkansızdır. Bu nedenle önce elektronların kristal içerisindeki istatistiksel davranışlarına bakılmıştır. Pauli dışarlama ilkesi elektronların uyması gereken istatistik yasalarını belirlemede en önemli faktördür.

Bant modelinin serbest elektron modelinden ayrıldığı en önemli nokta, kristal içerisindeki elektronun enerjisini artık sürekli değerler yerine bantlar şeklinde tanımlamasıdır. Enerjinin bantlar şeklinde tanımlanması kristaldeki bir elektronun yasak bantlarda bir enerji değeri alamayacağını, elektronun yalnızca izinli bantlarda bulunabileceğini gösterir. Bu durumlar izinli enerji ve yasak enerji kavramları ile ifade edilirler. Bu kavramları anlamak için hidrojen atomunu ele alalım. Hidrojen atomu kuantum mekaniğinde çözülen temel problemlerden birisidir ve elektron enerji özdeğerleri hesaplanabilmiştir. Bu analiz bize tek elektronlu bir atoma bağlı elektronun enerjilerinin kuantumlu olduğunu ve sadece bazı enerji değerlerini alabileceğini göstermiştir. Ayrıca hidrojen atomu probleminde elektronun radyal olasılık fonksiyonu da belirlenmiştir. Bu fonksiyon elektronun çekirdekten herhangi bir uzaklıkta bulunma olasılığını verir. Tek bir atom için bulunan bu sonuçlar kristale, iyon-iyon ve elektron-elektron etkileşmesi ihmal edilerek genişletilebilmiştir. Kuantum mekaniği ve Schrödinger denklemi kullanılarak problem, bir tek-kristal içerisindeki tek bir elektrona uygulanabilir. Aradaki fark bu kez Schrödinger denkleminde elektron-iyon etkileşimini veren terimin de hesaba katılmasıdır. Bu durumda problem hala tek parçacık problemidir.

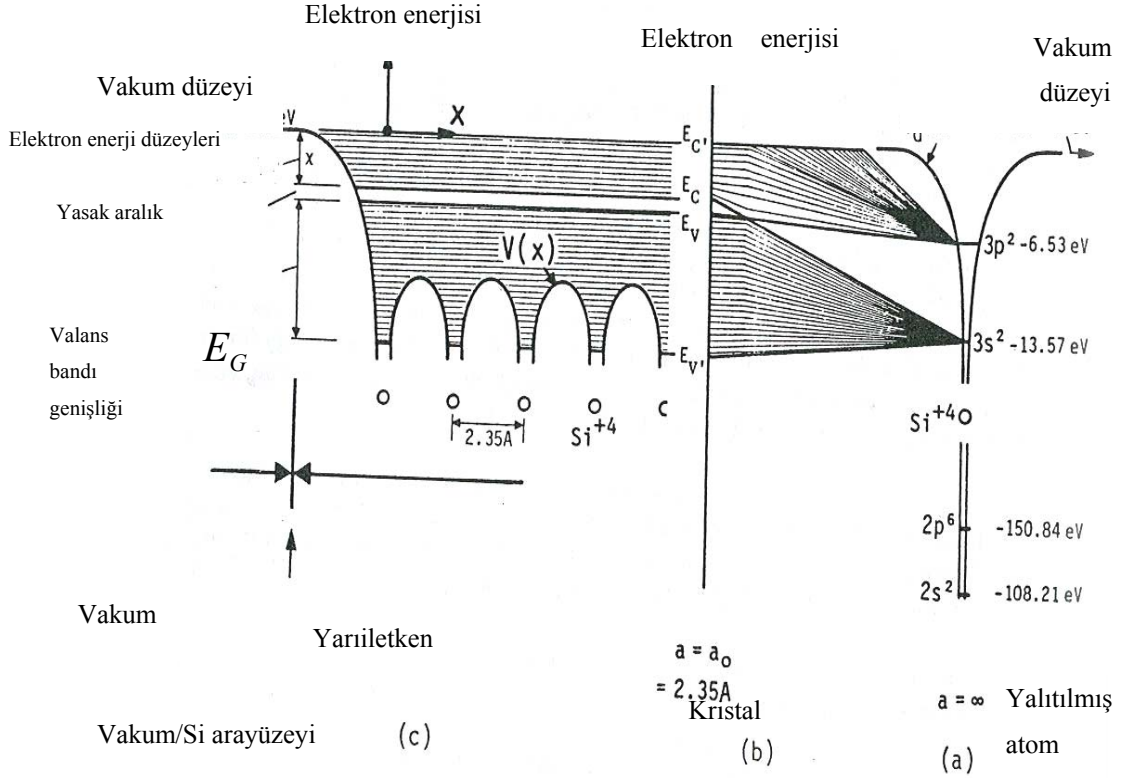
Eğer iki hidrojen atomunu birbirine yaklaştırsak elektronlarının dalga fonksiyonları üst üste biner. Bunun anlamı iki elektronun etkileştiğidir. Bu etkileşme sonucu enerji düzeyi ikiye ayrılır. Bu yarıma Pauli dışarlama ilkesinin sonucudur. Etkileşen iki parçacığın enerji düzeylerindeki yarılmayı açıklamak için aşağıdaki basit örneği kullanalım. İki özdeş yarış otomobili bitiş çizgisinden farklı uzaklıktadırlar. İki otomobil arasında hiçbir etkileşim yoktur. Dolayısıyla her iki araç da aynı hıza ulaşmak için eşit güçler harcamalıdır. Ancak arkadaki araç öndeki araca yaklaştığında aralarında 'sürüklenme' denilen bir etkileşme olur. Bu anda arkadaki araç öndeki araca doğru öndeki araç tarafından çekiliyormuş gibi hızlanır (Öndeki araç hava sürtünmesini yener ve arkadaki araç sürtünmeden daha az etkilenir). Öndeki aracın aynı hıza ulaşması için daha fazla güç harcaması gerekir. Arkadaki araç ise öndeki araca doğru hızlandığı için daha az güçle yoluna devam eder [11]. Böylece etkileşen iki yarış otomobilinin enerji değerlerinde bir yarıma oluşur. Şimdi varsayalım ki periyodik olarak düzenli dizilmiş hidrojen atomları var. Ancak bu başlangıç durumunda atomlar birbirleriyle etkileşmeyecek kadar uzaktalar. Atomları birbirine doğru yaklaştırabildiğimizi varsayalım. Elektronların enerji düzeyleri yarırlar ve bir bant oluşturur. Çünkü elektronlar Pauli dışarlama ilkesine göre aynı kuantum durumunda

bulunmamalıdır. Böylece her bir elektron ayrı bir kuantum durumunu işgal etmelidir ve enerji bandı kavramı bu durumlara karşılık gelen enerjilerin oluşturduğu kesikli yapıdır. Bu etki Şekil-2 de gösterilmektedir. Burada r_0 parametresi kristalin denge durumunda atomlar arası mesafeyi göstermektedir.



Şekil 2: Bir enerji düzeyinin yarılmaması.

Burada verdiğimiz örnekte izinli kuantum durumlarının sayısının küçük olduğu görülüyor. Ancak kristal içerisine girdiğimizde bantlar içerisinde oldukça çok sayıda enerji düzeyiyle karşılaşırız. Örnek olarak, 10^{19} tane tek elektronlu atomlardan oluşan ve denge durumunda izinli enerji bant genişliği 1 eV olan bir sistemi alalım. Açıkçası, böylesi bir sistemde her bir elektronun farklı enerji durumları arasındaki mesafe 10^{-19} eV olur. Bu enerji aralığı oldukça küçüktür ve pratik olarak enerji bandını hemen hemen sürekli kabul edebiliriz.



Şekil 3: Si kristalinde tek bir elektronun enerji düzeyleri.

Şekil-3 te (c) den (a) ya kadar katı içerisinde yalıtılmış atoma kadar tek bir elektronun enerji düzeyleri aşama aşama gösterilmiş ve enerji düzeylerinin sayısal değerleri Si için verilmiştir. Şekil-3 (a) da yalıtılmış nötr Si atomunun enerji düzeyleri gösterilmiştir. Valans kabuğu düzeyleri, vakum düzeyi altında ($V_L=0\text{eV}$) -6.53 eV da $3p^2$ ve yine vakum düzeyi altındaki -13.57 eV da $3s^2$ dir. Burada negatif işaret değerlerin vakum düzeyi altında olduğunu belirtmek için kullanılmıştır. Şekil-3 (b) de bir kristal yapısı oluşturacak biçimde yan yana dizilmiş pek çok nötr Si atomu bir araya geldiğinde, yalıtılmış bir atomun enerji düzeylerinin nasıl yukarı kaydığı ve enerji düzeyleri bandının kendi içinde nasıl genişlediği gösterilmiştir. Şekildeki 'a' en yakın komşu iki Si atomu arasındaki mesafedir ve örgü sabiti olarak bilinir. Si kristalinde $a_0 = 2.35 \text{ \AA}$, yalıtılmış bir Si atomu için ise atomlar arası hiçbir etkileşme olmadığını belirtmek için $a = \infty$ değerlerini alır. Şekil-3 (b) de $3s$ ve $3p$ valans elektronu enerji düzeylerinin, bir enerji aralığı ile birbirinden ayrılan ve enerji bantları olarak bilinen kendi içinde ikiye ayrıldığı da görülmektedir. E_G ile gösterilen enerji aralığı yasak enerji aralığı olarak bilinir çünkü elektron bu aralıkta bir enerji değerine sahip olamaz. Yasak aralığın üzerindeki banda iletim bandı, altındaki banda ise

valans bandı denir. Açıkça görülüyor ki valans ve iletim bandının her ikisi de yalıtılmış Si atomunun $3s^2$ ve $3p^2$ valans elektronu enerji düzeylerinden gelmektedir. Dolayısıyla dikkate alınması gereken bant yapısı valans elektronlarının bant yapısı olmalıdır. Valans elektronları çekirdeğe zayıf bağlı iken daha iç kabuktaki elektronlar çekirdeğe sıkı bağlıdır ve tamamen doludurlar. Bu elektronlar ve çekirdeğin tümü genellikle iyon koku olarak adlandırılırlar. Şekil-3 (a) da iyon koku enerjileri de gösterilmektedir. Bu enerji düzeyleri sırasıyla $2s^2$ de -150.84 eV ve $2p^2$ de -108.21 eV değerlerine sahiptir. Şekil-3 (c) de ise test elektronunun Si^{+4} iyon koku ve diğer valans elektronları ile Coulomb elektrostatik etkileşimi sonucu etkisinde kalacağı bir $V(x)$ potansiyelinin bir boyutta çizimi verilmiştir. Dikkat edilirse vakum-Si arayüzeyinden uzaklaşarak külçe Si içerisine gelindiğinde potansiyel enerjinin hemen hemen $a_o (= 2.35 \text{ \AA})$ periyodu ile periyodikleştiği görülür[12].

1.2 Etkin Kütle Yaklaşımı

Bir elektronun kristal içerisinde hareketi, genel olarak serbest uzaydaki hareketinden farklıdır. Eğer kristale bir dış kuvvet uygulanırsa, kristal içerisindeki elektrona etkiyen tek kuvvet bu olmaz. Kristalde pozitif yüklü iyonlar elektronun örgü içerisindeki hareketini etkiler. Şekil-4 te kristaldeki bir elektrona etkiyen kuvvetler görülmektedir. Bu durumda elektrona etkiyen toplam kuvvet aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\vec{F}_{TOPLAM} = \vec{F}_{DIŞ} + \vec{F}_{İÇ} = m\vec{a} \quad 1-1$$

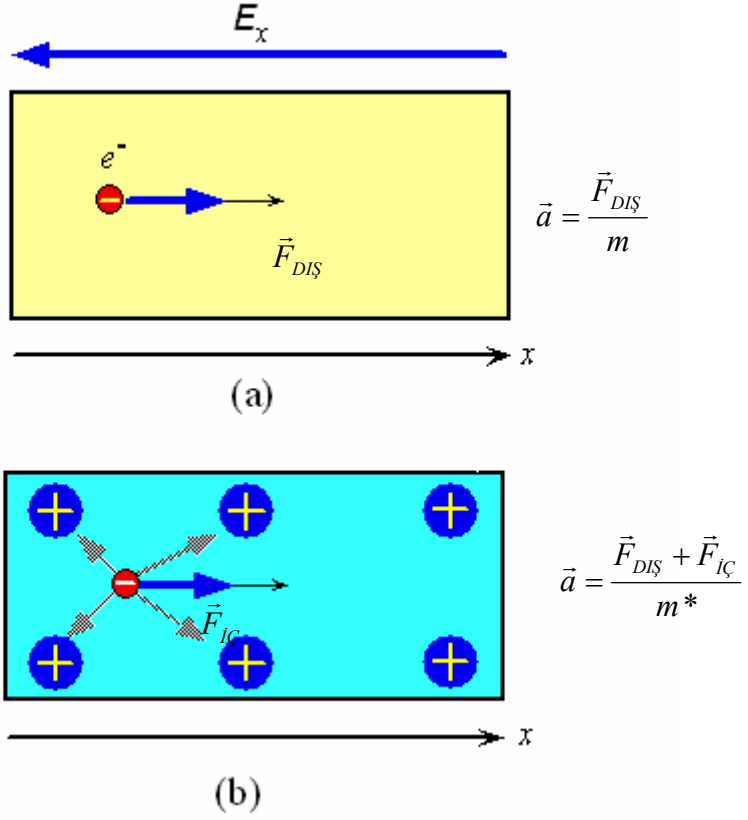
Burada a ivme, m ise elektronun durgun kütesidir. Kristal içerisindeki tüm iç kuvvetleri hesaplamak oldukça zor olduğundan, sanki m^* kütleli bir parçacığa yalnızca $\vec{F}_{DIŞ}$ kuvveti etki ediyormuş gibi düşünülebilir ve,

$$\vec{F}_{DIŞ} = m\vec{a} - \vec{F}_{İÇ} \quad 1-2$$

$$\vec{F}_{DIŞ} = m^* \vec{a} \quad 1-3$$

yazılabilir.

Burada a ivmesi artık doğrudan dış kuvvetle ilişkilidir. m^* parametresi ise ‘etkin kütle’ olarak adlandırılır ve parçacığın kütle değeri ile iç kuvvetlerin tümü m^* içerisinde saklıdır [12].



Şekil 4: (a) Serbest uzayda elektron. (b) kristal içerisinde bir elektron.

Etkin kütle kavramını bir benzetme kullanarak açıklayalım. Bir bardak bilyeyi birinci durumda su ile dolu bir kaba, ikinci bir durumda ise yağ ile dolu bir kaba boşalttığımızı varsayalım. Bilyelerin bu iki ortamdaki davranışlarını izleyelim. Beklenildiği gibi bilyeler su içerisine, yağdakine oranla daha hızlı düşecektir. Bu örnekte dış kuvvet gravitasyonel kuvvet, iç kuvvetler ise sıvının viskozitesi ile ilişkilidir. Burada, bilyenin düşerken dönmesi ve bilyeye etkiyen sürtünme kuvveti gibi tüm iç etkileri etkin kütle içerisine atarak bilyelerin serbest düşme yaptığını kabul ediyoruz. Ancak burada bilyenin ivmesi, artık g yerçekimi ivmesi ile değil denklem 1-5 ile verilir:

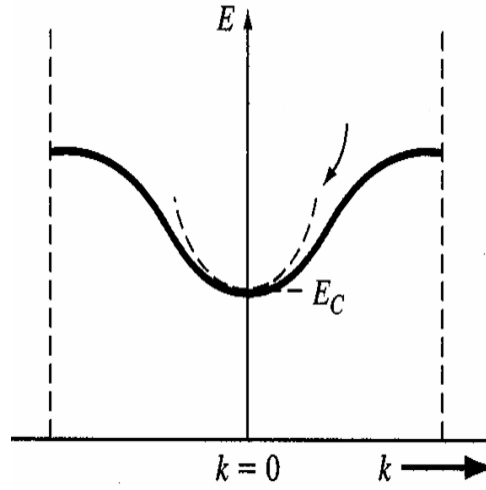
$$mg = m^* a \quad 1-4$$

$$a = \frac{mg}{m^*} \quad 1-5$$

Bu yaklaşım ile bilyelerin bu iki durumdaki davranışlarının farklı olma nedenini, bilyenin kütlesine bağlayarak açıklayabiliriz. Diyebiliriz ki su ve yağ dolu bu iki kabın yerine her ikisi de

boş olan iki kap var ve bunlar içerisinde sırasıyla farklı kütleli bilyeler serbest bırakılıyor. Burada son durumda serbest bırakılan bilyelerin kütlesi boş kablarn her ikisi için de, gerçek bilye kütlesinden farklı olur. Bilyenin bu şekildeki kütlesini bilyenin etkin kütlesi olarak ifade edebiliriz. Kristalde de elektronun etkin kütlesi bu örnekte olduğu gibi iç kuvvetleri içinde barındıran bu nedenle de çözümlerimizi kolaylaştıran ‘etkin kütle yaklaşımı’ nın bir sonucudur.

Kristalde elektronun etkin kütlesini Şekil-5 te gösterildiği gibi k 'ya karşı E eğrisini kullanarak açıklamaya çalışalım.



Şekil 5: İletim bandı.

Şekil 5 ‘hemen hemen serbest elektron modeli’ne göre çizilmiştir. Bilindiği gibi serbest elektron modelinde bu grafik bir paraboldür ve serbest elektronun enerji değerleri sürekli dir. Ancak hemen hemen serbest elektron teorisine göre yarıiletken için E-k eğrisi çizilirse bu eğrinin, kristalin örgü noktalarında sürekli olmadığı görülür. Bu grafik için yalnızca küçük k değerlerinde bir parabol yaklaşımı yapılabilir. Burada küçük k değeri ile kastedilen iletim bandının minimumu civarı ($k=0$ civarı) ya da valans bandının maksimumu civarıdır. Öyleyse bu yaklaşımın bir sonucu olarak, etkin kütle ifadesi ile serbest elektron kütlesinin $k=0$ civarında eşitliği sağlanmalıdır. Bu eşitliği göstermeden önce etkin kütle için bir ifade türetmeliyiz.

Serbest elektron modelinde, elektron dalga fonksiyonu $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ formunda düzlem dalga ile verilir. Dalga paketi için grup hızı denilen ortalama bir hız tanımlanır ve elektronun bu hızla hareket ettiği varsayılır.

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$$

1-6

Burada E serbest elektronun enerjisidir ve örneğin sisteme bir elektrik alan uygulanırsa değişecektir. Şimdi elektrona etkiyen kuvvetin büyüklüğünü Newton yasasına göre aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = \frac{dp}{dt} = m \frac{dv}{dt} \quad 1-7$$

Burada p elektronun momentumudur ve kuantum mekaniğinde,

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad 1-8$$

ile verilir. Eğer 1-5 denkleminde v hızı yerine yazılırsa aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad 1-9$$

Görüldüğü gibi bu sonuca göre m kütlesi E 'nin k ile değişimini içermektedir. Oysa biz elektronun kütlesini tek bir sabit olarak biliyoruz işte bu nedenle buradaki m kütlesi etkin kütle olarak adlandırılır ve çoğunlukla m^* ile gösterilir.

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad 1-10$$

Eğer bu ifadede E enerjisi yerine serbest elektron enerjisi $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ yazılırsa, elektronun etkin kütlesi ile boşluktaki kütlesinin birbirine eşit olduğu görülür.

Sonuç olarak elektron iletim bandı minimumunda klasik bir parçacık gibi düşünülebilir ve hareketi Newton mekaniği ile tanımlanabilir. İç kuvvetler ve kuantum mekaniksel özellikler doğrudan etkin kütle içine atılır. Ayrıca izinli enerji bandının minimumunda bir elektrona bir elektrik alan uygulanırsa elektronun a ivmesinin büyüklüğünü aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$a = \frac{-eE}{m_n^*} \quad 1-11$$

Burada m_n^* iletim bandının minimumu yakınındaki bir elektronun etkin kütlesidir ve sabittir.

1.3 Saf Yarıiletkenler

Bir yarıiletken kristalin saflığı farklı atom ya da kusurlar içermemesi ile belirlenir. Saf bir yarıiletkende düşük sıcaklıklarda, çok sayıda kovalent bağdan sadece bir kaç kırılır çünkü atomik korların ısısal(termal) titreşimi için yeterli ısısal ya da kinetik enerji yoktur. Böylece iletim bandında birkaç elektron ve valans bandında da sadece birkaç boşluk vardır. Saf yarıiletkende düşük sıcaklıklarda elektron ve hol konsantrasyonunun düşük olması nedeniyle elektriksel iletkenlik çok küçük, direnç yüksektir. Örneğin, saf silikonun direnci sıvı nitrojen sıcaklığında (77 K de) çok yüksektir ($\approx 10^{40}$ ohm-cm). Dolayısıyla bu durumdaki bir silikon sıfır iletkenliğe ya da sonsuz dirence sahip bir yalıtkandır. Karşılaştırmak amacıyla en iyi yalıtkanın oda sıcaklığında(300K) saf SiO_2 ya da kuartz olduğu ve direncinin 10^{18} ohm-cm olduğu söylenebilir[12,13]. Eğer sıcaklık artırılırsa, molekül ve atomların kinetik enerjisi artacağından atomik korlar daha hızlı titreşir elektron çifti bağlarının bazılarını kırar. Bağdan kurtulan her elektron ardında bir hol bırakarak ayrılır. Bu elektronlar ve holler, öz (intrinsic) taşıyıcılar olarak bilinir ve yarıiletkenin öz iletkenliğini sağlarlar. Oda sıcaklığında ($25^\circ C$ ya da 300K civarında), pek çok elektron çifti bağı güçlü örgü titreşimleri tarafından kırılır. Sonuçta saf silikon içerisinde $10^{10} cm^{-3}$ yoğunlukta elektron ve holler oluşur ve silikonun direnci 3.2×10^5 ohm-cm ye düşer.

Saf bir yarıiletken kristalde, tüm sıcaklıklar için elektron ve hol konsantrasyonu birbirine eşittir. Çünkü yukarıda belirtildiği gibi bir hol bağdan kopan bir elektrondan oluşur. Çünkü hol elektronun bıraktığı boşluktur.

Elektron konsantrasyonu N (sayı / cm^3) ve hol konsantrasyonu P (sayı / cm^3) ile gösterilir ve 'taşıyıcı yoğunluğu' olarak bilinirler. Katkısız yarıiletkende elektron ve hol konsantrasyonları eşittir ve n_i ile gösterilir. Burada 'i' indisi yarıiletkenin 'intrinsic (katkısız, öz)' olduğunu belirtir.

$$N=P=n_i$$

1-12

1.4 Katkılı Yarıiletkenler

Saf yarıiletkenlerde bile istenmeyen safsızlık atomları vardır ve bu atomları tamamen ayırt etmek oldukça zordur. Ancak zaman zaman saf yarıiletkenlere kontrollü olarak safsızlık eklenerek, yarıiletkenin iletkenliği ya da direnci büyük ölçüde değiştirilmektedir. Örneğin $300K$ de Si katkılanırsa direnci 10^5 ohm-cm den 10^3 ohm-cm ye düşer. Bin tane atomik düzlemden oluşan bir Si ince filmdeki safsızlık konsantrasyonunun tam bir kontrolü, silikon transistörlerin ve entegre (IC) teknolojisinin bel kemiğini oluşturur. Safsızlıklar, yalnızca yarıiletkenin iletkenliğinin büyüklüğünü değil, iletkenlik tipini de belirler. İletkenlik tipi ile kastedilen iletimin elektron ya da hol tarafından hangisi ile sağlandığının bilgisidir. n-tipi yarıiletkende elektrik iletimini sağlayan taşıyıcılar elektronlar, p-tipi yarıiletkende ise hollerdir. Daha genel bir ifade ile $N>P$ ise yarıiletken n-tipi, $P>N$ ise p-tipi, $N=P$ ise yarıiletken katkısızdır (intrinsic) denilir.

Safsızlık konsantrasyonu aşağıda özetlenen yollarla kontrol edilebilir:

- i. Safsızlık atomları kristalin büyütülmesi sırasında eklenir.
- ii. Kristal tabakalarının yüzeyi iyonlar ile bombardıman edilerek safsızlık atomları eklenir.
- iii. MBE, LPE veya VPE gibi ince film büyütme teknikleriyle yapılan epitaksiyel büyütme süresince safsızlık atomları eklenir.
- iv. Yüksek sıcaklıklarda saf kristal içerisine safsızlık atomları difüze olurlar (yayırlar).

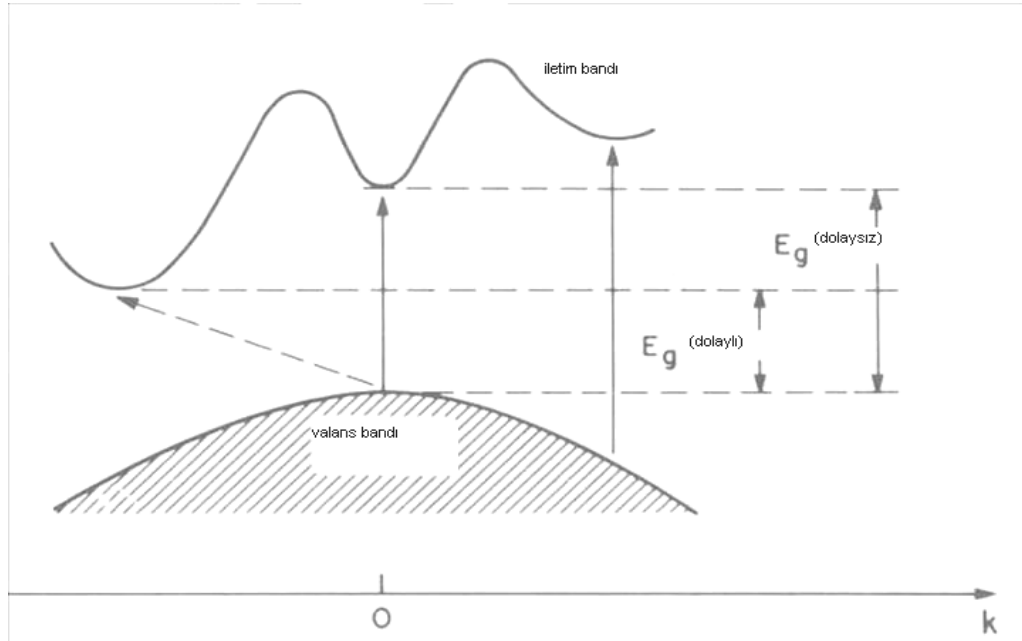
Bir safsızlık atomu, yarıiletkende bir örgü noktasına yerleşebilir ve burada yerleştiği yarıiletkenin atomuyla (ev sahibi atom ile) yer değiştirebilir (substitution impurity) ya da yarıiletkenin iki atomu arasında bir yere yerleşebilir (interstitial impurity)[12,14]. Ancak ikinci duruma yani safsızlık atomunun katkılanan materyalin iki atomu arasında bir yere oturması durumuna pek odaklanılmaz. Bunun nedeni bu konumdaki safsızlık atomunun elektriksel olarak aktif olmamasıdır ve yarıiletkenin elektriksel özelliklerine büyük bir katkı getirmezler.

1.5 Yarıiletkenlerde Optik Süreçler

Bir yarıiletkende optik süreç, materyalin ışığa yapması (radyasyon) ya da ışığı soğurması ile gerçekleşir. Işığın soğurulması ya da yayılması yarıiletkenin bant yapısına bağlıdır.

Materyalin ışığı soğurarak iletken hale geçmesi 'fotoiletkenlik' olarak bilinir ve fotodiyotların dolayısıyla da güneş pillerinin temelini oluşturur. Bunun tersi bir durum ise materyalin ısı, elektrik ve manyetik alan gibi bir dış etki ile ışığı yaymaması olayıdır ve ışık yayan diyotlar (LED) ve yarıiletken lazerlerin temelini oluşturur. Yarıiletken malzemeler bu optoelektronik devre elemanlarının yapımında tercih edilirken bant yapılarına bakılır. Yarıiletkenler bant yapılarına göre dolaylı (indirect) ve doğrudan (direct) olarak ifade edilirler.

Aşağıdaki şekil fotoiletkenlik için doğrudan ve dolaylı her iki geçişi de bir arada göstermektedir. $k=0$ değerinde gerçekleşen geçişte valans bandındaki bir elektron foton soğurarak fotondan aldığı enerji ile ardında bir boşluk bırakarak iletim bandına geçer. Valans bandındaki boşluk buradaki elektronlar tarafından doldurulur. Bu geçiş, doğrudan geçiştir ve momentum korunur.



Şekil 6: Bir yarıiletkende fotoiletkenlik olayı.

Elektronun fotonu tamamen soğurarak iletim bandına geçebilmesi için fotonun enerjisi en az yarıiletkenin yasak aralığı enerjisine eşit olmalıdır. Foton frekansı ν , dalga boyu λ ve c ışık hızı olmak üzere, gelen fotonun sağlaması gereken minimum enerji,

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad 1-13$$

eşitliği ile verilir.

Fotonun minimum enerjisinin E_g yasak enerji aralığına eşit olması gerektiğinden gelen foton için minimum frekans değeri,

$$\nu_{\min} = \frac{c}{\lambda_{\max}} = \frac{E_g}{h} \quad 1-14$$

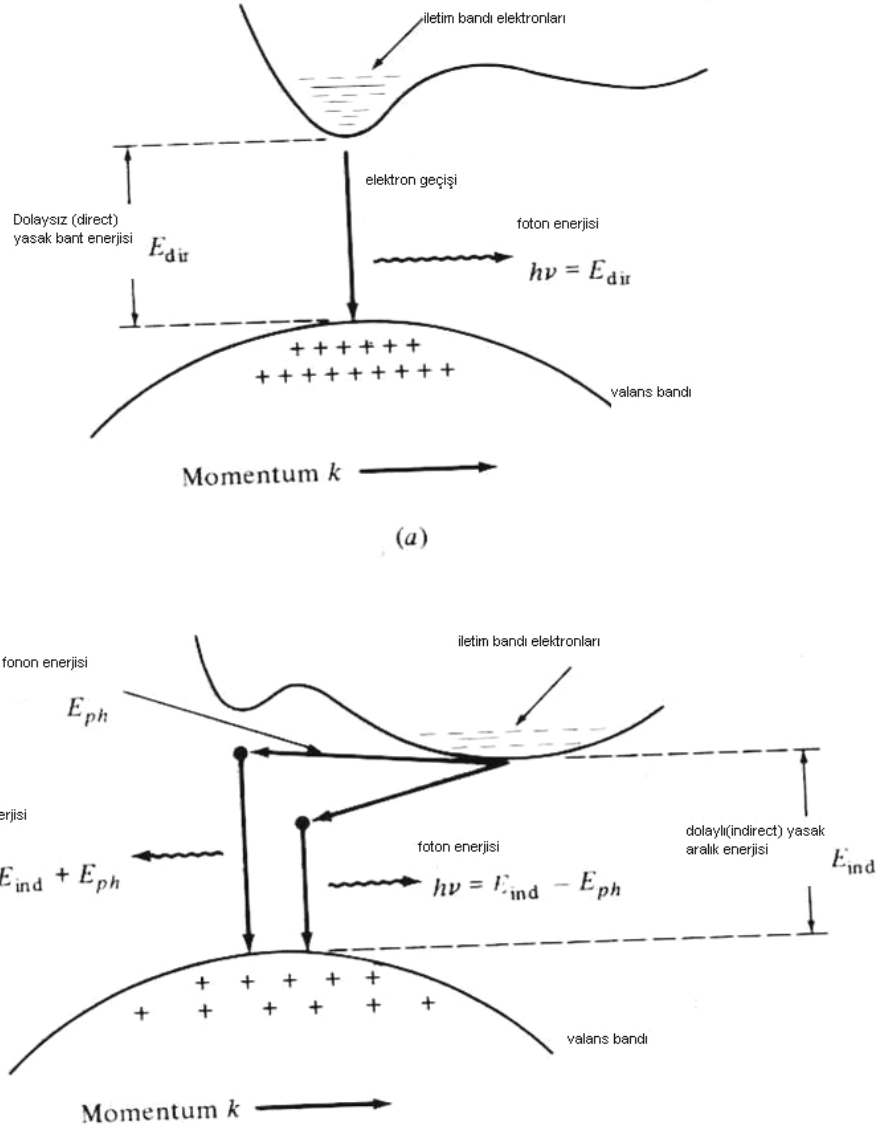
olur [13]. Sonuç olarak doğrudan bant geçişli bir yarıiletkenin, üzerine ışık düşürülerek iletkenliği büyük ölçüde artırılmak istenirse kullanılan ışığın frekansı ν_{\min} dan büyük olmalıdır.

Dolaylı geçişte ise momentumun korunabilmesi için valans bandında ışığı soğuran bir elektronun iletim bandına geçebilmesi için bir fononla etkileşmesi gerekir. Dolayısıyla elektrik iletimi elektronun bir fononla etkileşme ihtimaline bağlı olduğundan iletkenlik, doğrudan bant yapılı malzemelere oranla çok daha düşüktür. Aşağıdaki tabloda III, IV ve V grubu bazı yarıiletkenler için bant parametreleri verilmiştir. Burada 'I' (indirect) dolaylı, 'D' (direct) doğrudan geçiş simgelemektir.

Tablo 2: Dolaylı ve doğrudan bant geçişli bazı materyaller.

Materyal	Element Grubu	Yasak bant enerjisi E_g (eV)	Yasak bant dalgaboyu (mm)	Tip
Ge	IV	0.66	1.88	I
Si	IV	1.11	1.15	I
AlP	III-V	2.45	0.52	I
AlAs	III-V	2.16	0.57	I
AlSb	III-V	1.58	0.75	I
GaP	III-V	2.26	0.55	I
GaAs	III-V	1.42	0.87	D
GaSb	III-V	0.73	1.70	D
InP	III-V	1.35	0.92	D
InAs	III-V	0.36	3.5	D
InSb	III-V	0.17	7.3	D

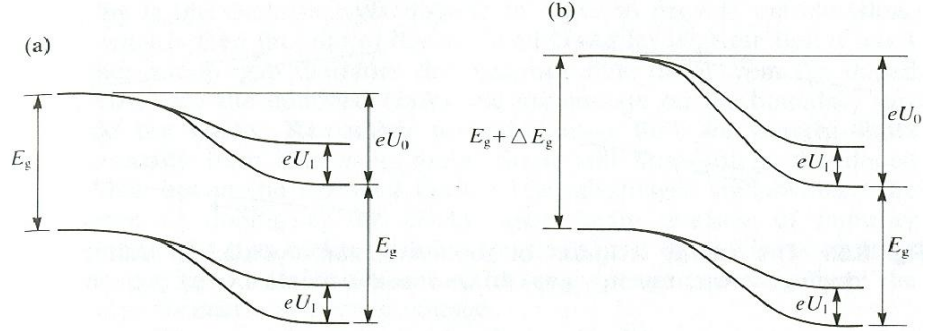
Yeniden birleşme (rekombinasyon) olayında iletim bandındaki bir elektron valans bandındaki bir holle birleşerek aradaki yasak enerji aralığına uygun frekansta ışık yayar. Dolayısıyla LED, lazer gibi cihazların yapımında dolaysız yarıiletkenler kullanılabilir. Dolaylı yarıiletkenlerde elektron holle birleşirken açığa çıkan enerji yarıiletkene ısı olarak aktarılır. Aşağıdaki şekilde bu olay özetlenmektedir.



Şekil 7: (a) Doğrudan bant yapısına sahip bir yarıiletkente rekombinasyon olayı. (b) dolaylı bant yapısına sahip yarıiletkente rekombinasyon olayı.

1.6 Heteroyapılar

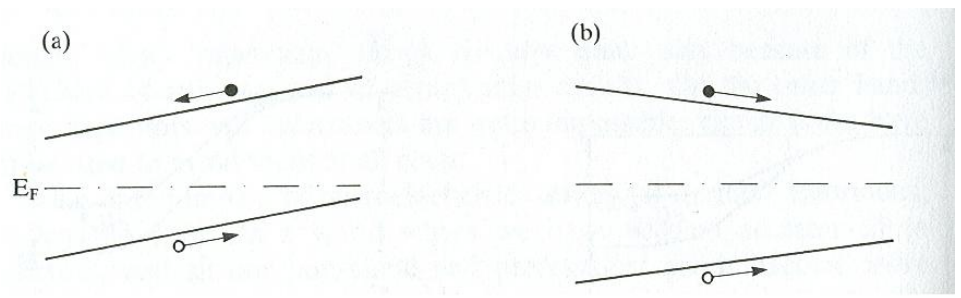
Heteroyapılarla, iki farklı yasak enerji aralığına sahip yarıiletkenlerin oluşturduğu yapılar kastedilir. Böyle bir yapıya neden ihtiyaç duyarız? Bu durum aşağıda şekilleri verilen p-n eklemeleri kullanılarak anlaşılabilir [14].



Şekil 8: Enerji diyagramı (a) bir homoelem, (b) bir heteroelem

Şekil 8(a) da doğru beslem altında bir p-n eklemi görülmektedir. Doğru besleme ile kastedilen, bataryanın negatif ucunun eklemnin n-tipi bölgesine, pozitif ucunun ise p-tipi bölgesine bağlanmasıdır. Burada eklemi oluşturan malzemelerin her ikisinin de aynı E_g yasak aralık enerjisine sahip olduğu görülmektedir. Böyle bir yapı 'homoelem' olarak bilinir. U_o yapının kontak potansiyeli (built-in voltage), U_1 ise dışarıdan uygulanan voltajdır ve U_1 voltajı ile kontak potansiyelinin düşürüldüğü görülmektedir. Bunun anlamı başlangıçta n-tipi bölgedeki bir elektron için bariyer yüksekliği U_o iken, doğru besleme ile yeni bariyerin $U_o - U_1$ olmasıdır. Bir p-n eklemde kontak potansiyeline rağmen n-tipi bölgeden p-tipi bölgeye elektronların sızdığı (diffuse) olduğu ve I_{dif} denilen bir akım oluşturduğu bilinmektedir. Öyleyse kontak potansiyelinin düşürülmesi I_{dif} difüzyon akımını artırır. Şekil-8.(b) de görülen yapı ise bir heteroelemdir. Bu daha sonra göreceğimiz TipII heteroelemdir. Burada heteroelemin n-tipi bölgesi Şekil-8 (a) daki materyal ile aynıdır dolayısıyla aynı E_g enerjisine sahiptir. Fakat p-tipi bölgesi materyali, yasak enerji aralığı $E_g + \Delta E_g$ olan farklı bir materyaldir. Bu yapıda hollerin davranışı için homoelem ve heteroelem arasında bir fark yoktur her iki durumda da n-tipi bölgeye geçen hol sayısında değişiklik olmaz. Fakat p-tipi materyalin enerji aralığı daha büyük olduğundan elektronlar artık daha büyük bir bariyerle karşı karşıyadır. Bunun sonucu n-tipi bölgeden p-tipi bölgeye sızan (injection) elektron sayısı heteroelemde homoeleme oranla daha azdır. Peki bu iyi bir şey midir? Eğer bir p-n-p transistörünün taban ve yayıcısı (base and emitter) arasındaki ilişki düşünülürse bu kesinlikle istenen bir şeydir. Çünkü bir p-n-p transistöründe

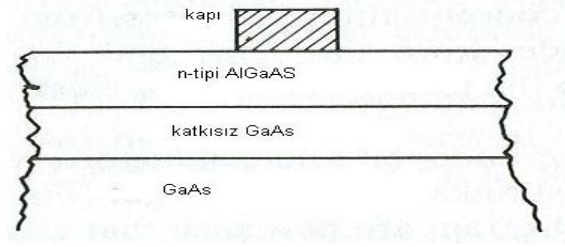
yayıcıdan tabana, tabandan da toplayıcıya (collector) hol akışı sağlanır. Bu noktada homoeklemde olduğu gibi burada da sıkıntı yoktur. Ancak tabandan yayıcıya elektron akışı istenmeyen bir durumdur. Tabanda aradaki potansiyele rağmen p-tipi bölgeye sızan elektronların önlenemesinin bir yolu olmalıdır. Eğer elektronların gördüğü bariyer yüksek tutulursa elektronların dikate değer bir kısmı engellenebilir. Bu mantıkla yola çıkılarak üretilen transistörler, HBT(Heterostructure Bipolar Transistor) olarak bilinirler. Şimdi tekrar heteroyapılara dönelim. Heteroyapılarda elektronlar ve holler uzun süre bağlı durumda kalamazlar. Aşağıda Şekil-9.(a) da katkılanmış bir homojen külçe yarıiletkenin enerji diyagramı verilmiştir.



Şekil 9:Yarıiletken bir kristalin enerji diyagramı. (a) değişken katkı, sabit enerji bandı. (b) katkı yok, değişken enerji bandı.

Burada bant aralığı sabit tutulurken, katkılama miktarı soldan sağa doğru gidildikçe artırılmıştır. Katkılama p-tipidir ve yapıda sağa gidildikçe alıcı konsantrasyonu artmaktadır. Elektronlar ve holler için seçenek en düşük enerjili durumdur ve açıkça elektronlar yokuştan aşağı doğru kayarken, holler yokuş yukarı kayacaklardır (aslında kendi potansiyeline göre yokuş aşağı). Bu durumda elektron ve hollerin akış yönü zıt yönlerde olur. Şekil 9.(b) de ise katkılanmış bir yarıiletken kristal görülmektedir. Yapının enerji aralığı soldan sağa doğru aşama aşama daraltılmıştır. Potansiyel enerji diyagramındaki yokuşlarda şimdi elektron ve hol aynı yönlerde hareket etmektedirler. Eğer elektron ve hol akışının ayrı ayrı kontrol edilmesi istenirse, aygıt dizaynında kuşkusuz heteroyapılar daha fazla tercih edilecektir.

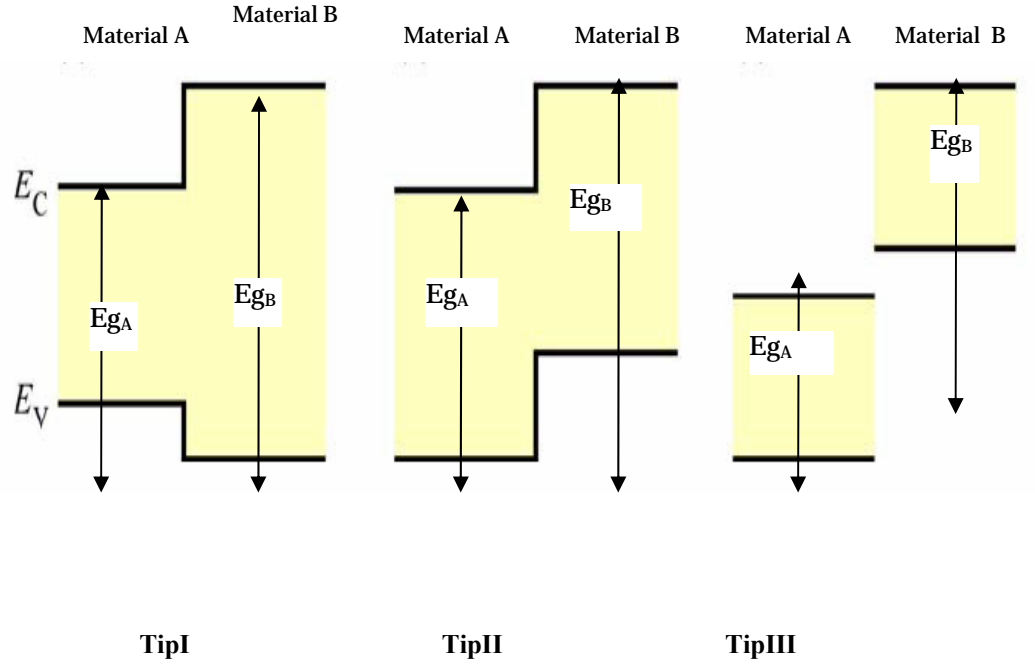
Heteroyapıların uygulamalarından birisi olan modülasyon katkılı alan etkili transistör (MODFET), yüksek elektron mobiliteli transistör (HEMT) olarak da bilinir. Şekil-10 da kapı bölgesi görülmektedir.



Şekil 10: HEMT temel yapısı.

GaAs kristali alttaş olmak üzere, üzerine katkısız *GaAs* tabası büyütülmüştür. Kapı bölgesinin hemen altında metal- *AlGaAs* - *GaAs* heteroyapısı vardır. Bu heteroyapının özelliklerini anlatmadan önce kısaca *AlGaAs* yapısına bakalım. Yapının örgü sabitindeki değişim çok küçüktür. Buna karşın yasak enerji aralığı *Al* atomlarından etkilenir. E_g bant enerjisinde bir artış olur. Bu artış örgüye katılan *Al* miktarıyla doğru orantılıdır. Bu nedenle bant enerjisi gereksinimlere göre düzenlenebilir. *AlGaAs* tabakası neden katkılanır? Amaç elektronlar elde etmek. Fakat *GaAs* tabakası katkısızdır, bunun bir kuralı var mıdır? *Al* miktarının enerji bandını artırdığı üstte ifade edilmişti. *GaAs*' in enerji aralığı daha küçük olduğundan elektronlar katkılanmış *AlGaAs*'tan katkısız *GaAs*' a doğru akacaktır ve *GaAs*' ta birikecektir. *GaAs* tabakasında safsızlık atomlarının olmaması safsızlık (impurity) saçılmalarının da olmaması demektir. Bu ise özellikle düşük sıcaklıklarda yüksek mobilite anlamını taşır. Böylece aynı voltaj ile daha hızlı aygıtlar yapılabilir ya da düşük voltaj ile aynı performans elde edilebilir.

Buraya kadar anlatılan örnekler TipI yapısı kullanılarak anlatıldı. Genel olarak heteroeklemler aşağıdaki biçimlerde bulunurlar.

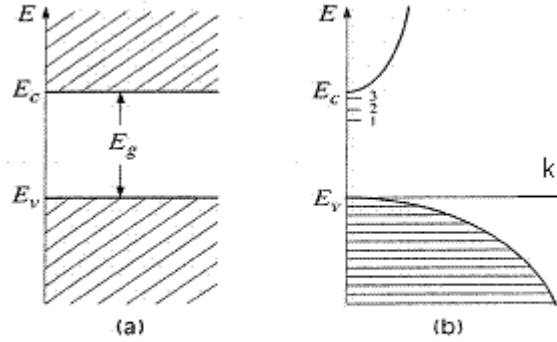


Şekil 11: Heteroyapı tipleri

1.7 Eksitonlar

Çalışmanın buraya kadar olan kısmında kusursuz bir kristalde hareket eden elektron ya da hollerden söz edildi. Kristaldeki elektronların birbiriyle olan etkileşimleri, benzer şekilde hollerin kendi aralarındaki etkileşimleri ve elektronlar ile holler arasındaki etkileşimler ihmal edildi. Ancak kristalde, Coulomb etkileşmesiyle birbirine bağlı bulunan bir elektron-hol çifti dikkate değer bir enerjiye sahiptir. Bu nedenle üstte bahsedilen etkileşimlerin tümünün ihmal edilmesi çok da doğru değildir. Elektronların karşılıklı etkileşmeleri saçılmaları artıracığından, bu etki yüksek taşıyıcı yoğunluğuna sahip olduğunda önemli olabilir [15] ancak bir elektron ve hol arasındaki etkileşme serbest taşıyıcı konsantrasyonu küçük olduğunda dahi ilginç sonuçlar vermektedir. Eksiton bağlanması, kristale uygulanan bir elektrik alan (bu dış etki, manyetik alan, sıcaklık vb. de olabilir.) ile değişiklikler gösterir. Her biri kendi etkin kütleleriyle hareket eden serbest elektron ve holler arasında Coulomb etkileşmesi sonucu bağlı bir sistem oluşur ve kristal içerisinde tek bir parçacık gibi dolaşır. Elektron ve holün oluşturduğu bu iki parçacıklı yapı 'eksiton' olarak bilinir ve yük bakımından nötrdür.

Saf bir kristalde eksiton üretilebilmesi için gerekli enerji, yasak bant enerjisinden biraz daha azdır. Bunun nedeni elektron ve holün bağlı durumda olmalarıdır. Dolayısıyla enerji düzeyleri Şekil-12 de görüldüğü gibi iletim bandının hemen altındadır.



Şekil 12: Eksiton enerji düzeyleri

Eksiton bağlanma enerjilerinin hesaplanmasında basitlik açısından Hidrojen atomu problemi (gerçekte eksiton pozitronyum atomuna benzer) kullanılabilir. Çünkü hidrojen atomu problemi iki parçacığın Coulomb etkileşmeleri altındaki hareketinin çözümlerini verir. Eğer, eksiton kütle merkezinin hareketi ihmal edilir ve elektron ve holün etkin kütleleri (m_e ve m_h) kullanılırsa, eksiton sisteminin enerjisi aşağıdaki gibi bulunur:

$$W_{ex}^n = -\left(\frac{m_r}{m}\right) \frac{\varepsilon_0^2 W_H}{\varepsilon^2 n^2} \quad \mathbf{1-15}$$

Burada m_r , iki parçacığın indirgenmiş (reduced) kütesidir ve

$$m_r = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h} \quad \mathbf{1-16}$$

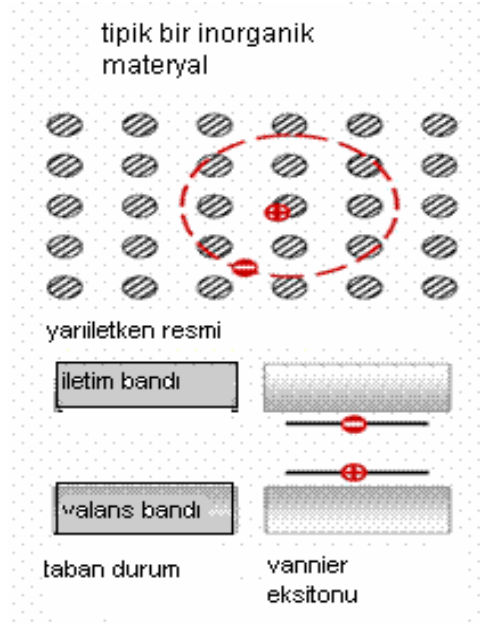
ile verilir. ε dielektrik sabiti, $W_H = 13.6$ eV Hidrojen atomunun taban durum enerjisi, n tamsayı ve m , elektronun serbest uzaydaki kütesidir. Eksiton bağlanma enerjisi W_{ex}^n 'e daha dikkatli bakılırsa en düşük enerji düzeyi ($n=1$) ya da eksitonun taban durum enerjisi W_{ex}^1 olup Şekil-12 den de görüldüğü gibi iletim bandının altındadır. Diğer kuantum durumlarındaki eksiton enerjileri ise $\frac{W_{ex}^1}{4}$, $\frac{W_{ex}^1}{9}$, $\frac{W_{ex}^1}{16}$, biçiminde azalarak iletim bandına yaklaşırlar. Gerçekte $n \rightarrow \infty$ 'a kadar değer alan sonsuz tane enerji düzeyi vardır. Ancak $n \rightarrow \infty$ değeri için eksiton bağlanma enerjisi, iletim bandına karşılık gelir ki bu durumda artık elektron ve hol bağlı değildir. Benzer şekilde eksiton enerji düzeyleri valans bandında da bulunamaz.

Mükemmel bir yarıiletken kristale sahip olduğumuzu varsayalım. Valans bandı tamamen dolu, iletim bandı boş ve iki bant arasındaki yasak aralık sonlu bir değerde olsun. Kristalin ilk enerji düzeyi elektronik enerji düzeyi ile verildiğinden, bir elektronun valans bandından ayrılarak iletim bandına geçtiği duruma bakalım. Elektron ve holün her ikisi de sıfır kinetik enerji ile biri iletim bandının minimumunda diğeri valans bandının maksimumunda bulunmaktadır. Eksitonları ihmal ettiğimizde kristalin taban durum enerjisi ΔE ile verilebilir. Ancak elektron ve holün bu durumu kararsızdır. Her ikisi de en düşük enerjili durumu tercih etmek isteyeceklerinden etkileşirler ve bir eksiton oluştururlar. Şimdi kristalin taban durum enerjisi değişmiştir ve $\Delta E - |W_{ex}^1|$ değerine düşmüştür. Burada ΔE yasak enerji aralığının büyüklüğüdür [16].

1.8 Eksiton Türleri

Eksitonlar iki limit durumunda incelenmiştir. Birinci durumda, bağlanma enerjisi oldukça zayıftır ve elektron ve hol geniş yarıçaplı bir yörüngede birbirine bağlı hareket ederler. Bu tip eksitonlar, Wannier-Mott eksitonları olarak bilinirler. İkinci durumda ise elektron ve hol birbirine sıkı bağlıdır ve kristal içerisinde aynı sitede (aynı atom etrafında) bulunurlar. Bu eksiton tipi ise Frenkel eksitonu olarak bilinir.

1.8.1 Wannier-Mott eksitonları



Şekil 13: Wannier Eksitonu. Bağlanma enerjisi $\approx 10\text{meV}$, yarıçapı $100A^\circ$

Yarıiletkenlerde statik dielektrik sabitinin büyük olması, elektron ve hol arasındaki Coulomb etkileşmesini büyük ölçüde azaltmaktadır. Bu nedenle elektron-hol çifti arasındaki mesafe, kristal örgü sabitine oranla çok daha büyük olur. Eğer elektron-hol arası mesafe örgü sabitinden çok büyükse, elektron ve holün her ikisi için de dalga fonksiyonları, sıfır civarında \vec{k} dalga vektörüne sahip Bloch dalgaları cinsinden yazılabilir. Elektron ve holün, kristal içerisinde periyodik bir potansiyelle etkileştikleri kabul edilerek ve yalnızca elektron ve holün etkin kütleleri dikkate alınarak, eksiton sisteminin hamiltonyeni aşağıdaki gibi yazılabilir:

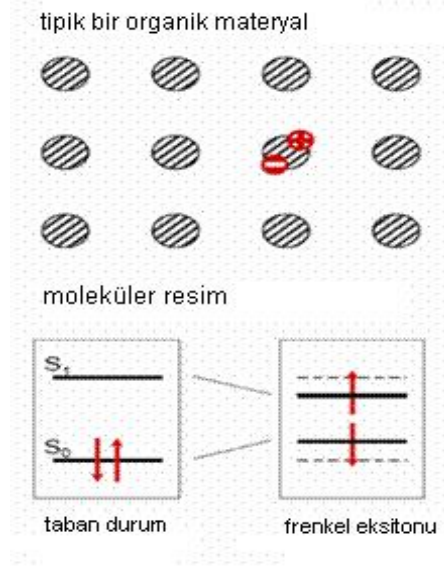
$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_e^*} + \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{\epsilon_o |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} - E \right] \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = 0 \quad 1-17$$

Burada ϵ_o , statik dielektrik sabitidir. Bu denklemde hole ait terimleri gösteren 'h' indisi yerine protonu simgeleyen 'p' indisi getirilirse denklem, hidrojen atomunun hamiltoniyeni ile aynı olacaktır. Dolayısıyla her iki sistem için de (hidrojen atomu ve eksiton) aynı matematiksel çözüm yöntemi izlenebilir. Eksiton bağlanma enerjisi, bu durum dikkate alınarak bulunmuş ve denklem 1.15 ile verilmişti. Hidrojen atomunun Bohr yarıçapı $a_o = 0.529 \text{ \AA}$ alınarak ve denklem 1.15 de kullanılarak, eksiton sisteminin yarıçapı, Bohr yarıçapı cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$a_o^* = \frac{\epsilon_o \hbar^2}{e^2 m_r} = \frac{m \epsilon_o}{m_r} 0.529 \text{ \AA} \quad 1-18$$

m_r indirgenmiş kütlesi, tipik olarak elektron kütesinin yarısı ya da daha azı olduğundan ve bir yarıiletken için dielektrik sabiti 10 alınabileceğinden, a_o^* 'ın, hidrojen atomunun yarıçapından 20 kez daha büyük olduğu 1.18 denkleminden kolaylıkla görülebilir. Bağlanma enerjileri ise 1.15 denkleminde yarıçaptakine benzer bir analiz yapılarak, Rydberg sabitinin 100 katı civarında ya da 0.1eV olduğu bulunur [16,19].

1.8.2 Frenkel eksitonları

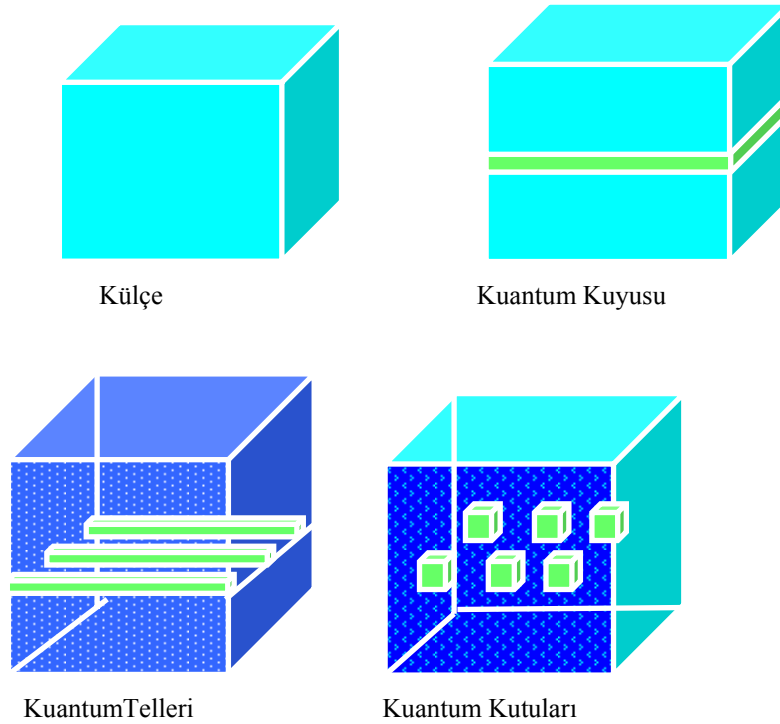


Şekil 14: Frenkel eksitonu. Bağlanma enerjisi $\approx 1\text{eV}$, yarıçapı 10\AA .

Frenkel eksitonları, yalıtkanlardaki elektron ve hollerin sıkı bağlanmasıyla oluşan eksitonlardır ve tek bir parçacık gibi kristal içerisinde hareket ederler. Eksiton yarıçapı, örgü sabitine oranla çok küçüktür. Bu tez çalışmasında Wannier-Mott eksitonları ile çalışıldığından Frenkel eksitonları için detaya inilmemiştir [16,19].

1.9 Nanoyapılar: kuantum kuyu, telleri ve noktaları

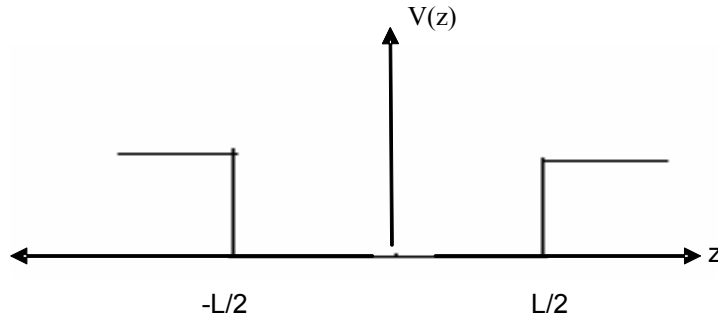
Elektronların, dalga boyu ile kıyaslanabilir boyutlarda sınırlandırıldığı ya da hapsedildiği durumlarda kuantum mekaniksel etkiler ortaya çıkar. Bu etkiler sonucu, düşük boyutlu yapılarla üretilen aygıtlarda, aygıtın ilettiği akım gerilime karşı son derece duyarlıdır ve bu nedenle de çok iyi kontrol edilebilir. Bu aygıtların temelinde yatan kuram, elektronların dalga karakteristiğidir. Düşük boyutlu bir yapının biçimi ve materyalleri hiç değiştirilmeden, boyutları elektron dalga boyundan çok büyük olacak biçimde büyütülürse ilk durumda gözlenen elektriksel ya da optiksel özellikler bu yeni boyutlarda gözlenemez. Bunun daha iyi anlaşılabilmesi için günümüzde yaygın olarak kullanılan *GaAs*/*AlGaAs* materyalleri üzerinde düşünülebilir. Daha önce ifade edildiği gibi $Al_xGa_{1-x}As$ ' in yasak bant genişliği, *GaAs*' in yasak bant genişliğinden büyüktür. Bu iki materyalden bir kuantum kuyusu elde edebilmek için, materyaller, dışta her iki tarafta $Al_xGa_{1-x}As$, içte *GaAs* kalacak biçimde Şekil-1 de gösterildiği gibi sandviç edilirler. Eğer bu yapıda *GaAs* genişliği 20 \AA 'dan büyük 400 \AA 'dan küçük ise kuantum kuyu etkileri görülecektir. Aşağıda düşük boyutlu yapılar gösterilmektedir.



Şekil 15: Düşük boyutlu yapılar.

Bölüm 1.6 da heteroyapılar anlatılırken, potansiyel bariyerleriyle sınırlanmış ve bu bariyerler arasında kalan, elektriksel olarak aktif bir bölge görülmüştü. Bu aktif bölge sıkça kuantum kuyusu olarak bilinir. Kuantum kuyuları iki özel limit durumunda sınıflandırılabilirler. Bunlar klasik ve kuantum kuyularıdır. Klasik bir kuyunun genişliği, kuyudaki elektron ya da holün de Broglie dalga boyu ile karşılaştırıldığında oldukça büyük iken, kuantum kuyuları için bu değer dalga boyu ile kıyaslanabilir ya da daha küçüktür. Ancak bir kuantum kuyusunun genişliğini ayarlama da bir alt sınır gereklidir. Genişliğinin minimum değeri, teorik hesaplamalar için elektronun bir kristal içerisinde bulunduğunu gösterebilmelidir. Örneğin *GaAs* için örgü sabiti $a = 5.65 \text{ \AA}$ değerindedir ve en az üç tabakası alınması gerektiğinden kuyu genişliği için alt sınır 18\AA civarında olmalıdır. Benzer şekilde genişliğin, kuantum etkilerini yok etmeyecek bir üst sınırı olmalıdır ve bu değer elektronun o kristal içerisindeki ortalama serbest yolu ile verilir.

Bu bölümde kuantum kuyuları, telleri ve noktaları olmak üzere idealleştirilmiş üç tip kuantum yapısı anlatılmıştır. İdealleştirilmiş yapılar ile aşağıda bahsedilen basitleştirmelerin yapıldığı kastedilmektedir. İlk basitleştirme, elektron (ya da hol) için tanımlanan m^* etkin kütle sinin. heteroekleme girdiğinde genel olarak değişmesine karşın, ideal bir yaklaşım yapılarak bu etki ihmal edilmiştir. Diğer bir basitleştirme heteroyapılardaki potansiyel enerji profili olup, ideal bir yaklaşımla potansiyel profili basamak biçiminde alınmıştır. Aşağıda ideal potansiyel kuyu profili gösterilmektedir.



Şekil 16: Kuantum kuyu profili

Bir kuantum kuyusu, aynı materyalden yapılmış iki tabakanın arasına, farklı bir materyal büyütülerek üretilir. Bariyer malzemesinin yasak bant aralığı içteki malzemenin bant aralığından büyük olmalıdır. Böyle bir yapıda bant süreksizliği, kuyu içerisinde taşıyıcıların kuşatılmasını sağlar. Bu sistemde idealleştirilmiş potansiyel aşağıdaki gibi verilir:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq L_z/2 \\ V, & |z| \geq L_z/2 \end{cases} \quad \mathbf{1-19}$$

Burada V ve L_z sırasıyla kuyunun derinliğini ve genişliğini göstermektedir. Böyle bir kuyuda $V(z)$ potansiyelinin yalnızca z 'nin fonksiyonu olması elektronun tek bir yönde kuşatılmış olduğunu gösterir. Öyleyse elektron x ve y yönünde serbest olup, bu yönlerdeki dalga fonksiyonu düzlem dalga ile verilir.

Kuantum telleri, iki boyutu elektron dalga mertebesinde olan kuantum kuyusu gibi düşünülebilirler. Böylece kuantum telindeki bir elektron iki yönde kuşatılmışken, tek yönde serbest olur. İki boyutlu $V(y, z)$ kuşatma potansiyeli,

$$V(y, z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq L_z \\ V, & y \leq 0, z \leq 0, y \geq L_y, z \geq L_z \end{cases} \quad \mathbf{1-20}$$

ile verilir.

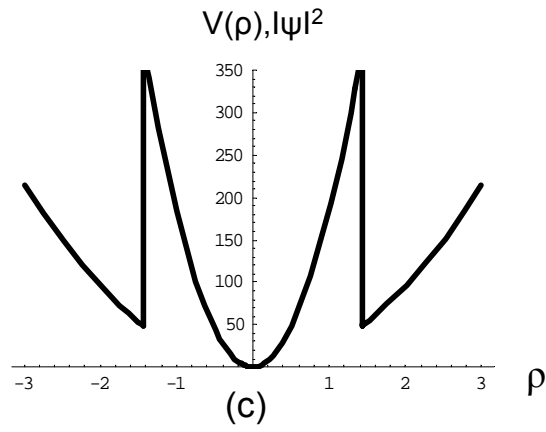
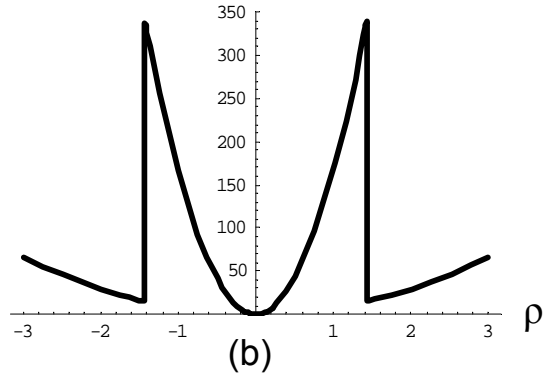
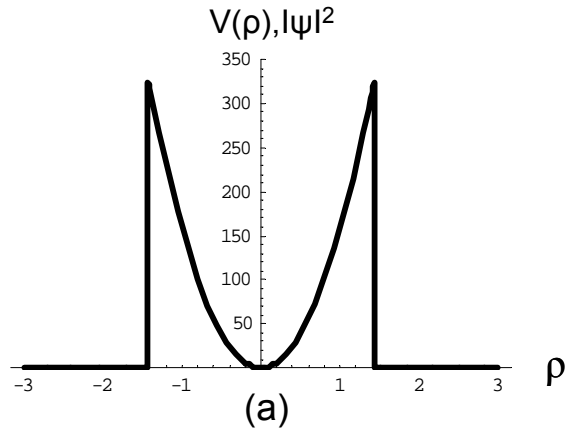
Kuantum kutuları ya da noktaları sıfır boyutlu sistemler olarak bilinirler. Elektron bu yapılarda üç düşük boyut içerisinde hapsedilir ve enerjisi üç yönde de kuantize olur. $V(x, y, z)$ kuşatma potansiyeli,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{kutu içinde} \\ V, & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \quad \mathbf{1-21}$$

ile verilir.

Kuantum kuyu, telleri ve noktaları için dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerleri hesaplanabilir. İlgili problem simetrisine uygun koordinatlarda çözülür.

Bu tezde çalışılan nano yapı ise silindirik kuantum telidir. Kuantum telinin uzaysal kuşatması parabolik seçilmiş ve manyetik alan da uygulanarak çift parabol sistemi elde edilmiştir. Çift parabolik kuyu yapısının nasıl oluşturulduğu aşağıdaki şekilde gösterilmiştir:



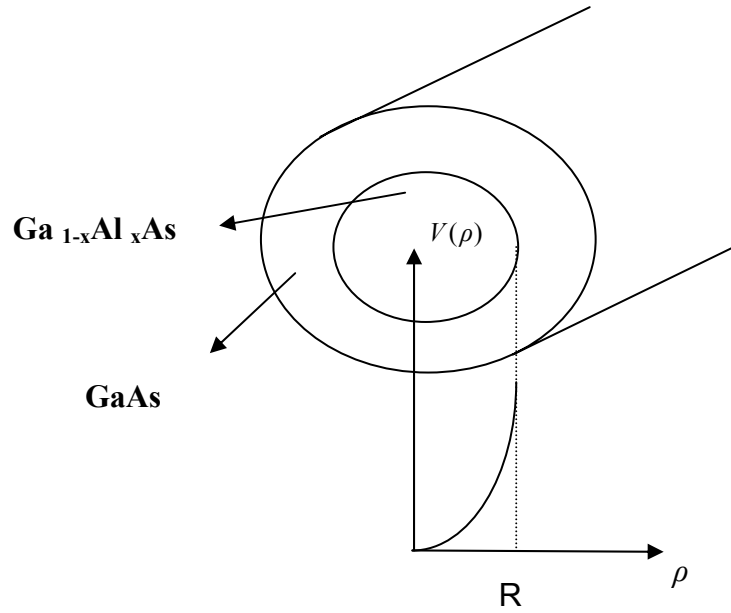
Şekil 17:Parabolik uzaysal kuşatma. (a) manyetik alan yok (b) düşük manyetik alan (c) yüksek manyetik alan

Şekil-17 (a) da parabolik uzaysal kuşatma görülmektedir. Sisteme manyetik alan uygulanmamıştır. Şekil-17 (b) de sistem üzerine düşük bir manyetik alan uygulanmıştır. Manyetik alan nedeniyle oluşan ikinci parabol yayvandır ve şekilden görüldüğü gibi uzaysal kuşatma potansiyelinde fark edilir bir değişim yaratmamıştır. Şekil-17 (c) de ise manyetik alan değeri artırılmıştır ve manyetik alanın uzaysal kuşatmayı artırdığı görülmektedir. Öyleyse çift parabolün manyetik alan ile ayarlanabilir olduğu söylenebilir. Daha sonra bulgularda görüleceği gibi, iki parabol arasında oluşan cepteki bir elektronun enerji düzeyleri manyetik alan ile değiştirebilir. Ayrıca uzaysal kuşatmanın parabolik seçilmesi ile teorik hesaplamalarda kolaylık sağlanmıştır. Bunun nedeni, manyetik alan altındaki kuyu probleminin çözümlerinin biliniyor olmasıdır. Teorik hesaplamalarda parabolik uzaysal kuşatma da ikinci bir manyetik alan gibi düşünülerek problem kolaylaştırılmıştır.

2 YÖNTEM VE TEKNİKLER

2.1 Düz Çift Parabolik Kuşatmada Elektronik Enerji Düzeyleri

Çalışmanın bu kısmında eksitonik hesaplamalarda kullanılacağı için, $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ kuantum telinde tel eksenine paralel uygulanan manyetik alan altında sistemin elektronik enerji düzeyleri bulunmuştur. Aşağıdaki şekilde silindirik kuantum telinin şematik gösterimi verilmiştir (Şekil 18).



Şekil 18: Silindirik kuantum telinin şematik gösterimi

Manyetik alan ve parabolik uzaysal kuşatma altında R yarıçaplı silindirik kuantum telindeki bir elektronun Hamiltoniyeni,

$$H = \frac{(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m^*} + V(\rho, \phi) \quad 2-1$$

ile verilir. Burada \vec{P} elektronun momentumunu, e elektronun yükünü, m^* elektronun etkin

kütlesi, c ışık hızını gösterir. \vec{A} ise vektör potansiyelidir ve

$$\vec{A} = \frac{(\vec{B} \times \vec{r})}{2} \quad 2-2$$

biçiminde seçilmiştir. Bu seçim \vec{A} için tek değildir. \vec{B} manyetik alanını değiştirmeksizin, \vec{A} 'ya herhangi bir fonksiyonun gradyenti eklenebilir. Ancak bu seçim çok uygundur. Çünkü \vec{B} manyetik alanının doğrultusu z -eksenini tanımlıyorsa, \vec{A} vektör potansiyelinden Hamiltoniyene gelecek katkı terimi iki boyutlu bir harmonik osilatör potansiyeli biçimindedir. $V(\rho, \phi)$ terimi ise skaler potansiyeldir ve

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} V_0 \left(\frac{\rho}{R}\right)^2, & \rho \leq R \\ 0, & \rho > R \end{cases} \quad 2-3$$

şeklinde tanımlanmıştır.

\vec{P} , \vec{A} ve $V(\rho, \phi)$ değerleri Hamiltoniyende yerine yazılıp gerekli düzenlemeler yapılırsa Hamiltoniyen,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} (x^2 + y^2) + V(x, y) \quad 2-4$$

biçiminde elde edilir. Burada L_z açısal momentum operatörünün z -bileşenidir [18]. Denklem 2-4 de dahil olmak üzere Bölüm 2.1 deki gerekli tüm ifadeler için ayrıntılı çözüm [9] nolu kaynakta verilmiştir.

Silindirik koordinatlarda Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} + V(\rho, \phi) \quad 2-5$$

$$H\Psi(\rho, \phi, z) = E\Psi(\rho, \phi, z) \quad 2-6$$

Hamiltoniyen 2-6 ile verilen özdeğer denkleminde yerine yazılarak dalga fonksiyonları için aşağıdaki sonuçlar elde edilebilir.

Elektron üzerinde z yönünde bir kuşatma olmadığından, elektronun z yönündeki dalga fonksiyonu, serbest parçacık çözümüdür ve düzlem dalga ile verilir.

$$\Psi(z) = Ae^{ik_z z} \quad 2-7$$

ϕ yönündeki çözüm ise, elektron bu yönde 2π periyoduna sahip olduğundan, aşağıdaki gibidir:

$$\Psi(\phi) = Be^{im\phi} \quad 2-8$$

Burada m tamsayıdır.

ρ yönündeki çözüm bu aşamada bilinmediğinden, çözüm $U(\rho)$ fonksiyonu ile gösterilerek elektronun genel dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\rho, \phi, z) = Ne^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) \quad 2-9$$

biçiminde yazılabilir. Burada N normalizasyon katsayısıdır ve

$$\int_{\text{tüm}} |\Psi|^2 d\tau = 1 \quad 2-10$$

uzay

ifadesinden bulunur. $U(\rho)$ fonksiyonu ise $\Psi(\rho, \phi, z)$ genel çözümü Schrödinger dalga denkleminde yerine yazılarak bulunur. $U(\rho)$ 'ya bağlı diferansiyel denklem düzenlenmiş şekliyle aşağıdaki gibidir:

$$\frac{d^2 U(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dU(\rho)}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} U(\rho) - \omega^2 \rho^2 U(\rho) + \lambda U(\rho) = 0 \quad 2-11$$

Burada ω siklotron frekansıdır.

$$\omega = \frac{eB}{m^* c} \quad 2-12$$

2-11 denkleminde $\omega\rho^2=\xi$ dönüşümü ve gerekli düzenlemeler yapılarak aşağıdaki boyutsuz diferansiyel denklem bulunmuştur.

$$\xi \frac{d^2U(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dU(\xi)}{d\xi} + \left(-\frac{m^2}{4\xi} - \frac{\xi}{4} + \frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} \lambda_o - \frac{m}{2} \lambda_o\right)U(\xi) = 0 \quad 2-13$$

Bu denklemin çözümleri ;

$$U(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} x \quad 2-14$$

$$(HypergeometricU[-a_{|m|l}, 1 + |m|, \xi] + LaguerreL[a'_{|m|l}, |m|, \xi])$$

biçimindedir[8].

Elektronun ρ yönündeki çözümü de bilindiğine göre genel dalga fonksiyonu yazılabilir.

$$\Psi(\xi, \phi, z) = Ne^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} x \quad 2-15$$

$$(HypergeometricU[-a_{|m|l}, 1 + |m|, \xi] + LaguerreL[a'_{|m|l}, |m|, \xi])$$

Ancak elektronun davranışı, kuyu içinde ve kuyu dışında farklılıklar göstereceğinden dalga fonksiyonları da farklıdır. $\xi \rightarrow 0$ iken $HypergeometricU[-a'_{|m|l}, 1 + |m|, \xi]$ fonksiyonu iraksar, bu ise fiziksel değildir. Böylece içerideki çözüm;

$$\Psi_i(\xi, \phi, z) = Ne^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} LaguerreL[a'_{|m|l}, |m|, \xi] \quad 2-16$$

olur. Kuyu dışında ise $\xi \rightarrow \infty$ iken $LaguerreL[a'_{|m|l}, |m|, \xi]$ fonksiyonu iraksar ve dışarıdaki çözüm;

$$\Psi_a(\xi, \phi, z) = Ne^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} HypergeometricU[-a_{|m|l}, 1 + |m|, \xi] \quad 2-17$$

biçiminde bulunur.

Burada $a_{|m|\ell}$ ve $a'_{|m|\ell}$ ler sonlu silindirik kuyudaki elektron için enerji özdeğerlerini veren parametrelerdir. $a_{|m|\ell}$ ve $a'_{|m|\ell}$ ler süreklilik koşullarından birbiri cinsinden bulunabilirler ve elektron için enerji özdeğerleri aşağıdaki biçimde elde edilir.

$$E_{m\ell} = \hbar\omega_c \left[a'_{|m|\ell} + \frac{|m| + m + 1}{2} \right] \left(1 + \frac{4V_o}{\frac{1}{2}m^* \omega_c^2 R^2} \right)^{1/2} \quad 2-18$$

Burada elektron için z yönündeki kinetik enerji referans alınmıştır, dolayısıyla bu terim 2-18 ifadesinde görülmemektedir.

Elektronun taban durum enerjisi ($m=0, \ell=1$) ise

$$E = \hbar\omega_c \left(a'_{01} + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{4V_o}{\frac{1}{2}m^* \omega_c^2 R^2} \right)^{1/2} \quad 2-19$$

olarak bulunur. Burada V_o , kuyu sınırındaki ($\rho=R$) potansiyel değeridir. Denklem 2-19 a dikkat edilirse V_o sıfır olduğunda taban durum enerjisi,

$$E = \hbar\omega_c \left(a'_{01} + \frac{1}{2} \right) \quad 2-20$$

biçiminde olur. Manyetik alanın küçük, kuyu yarıçapının büyük olduğu durumlarda a'_{01} değerleri tamsayılarla yaklaşır ve 2-20 denklemini bilinen Landau düzeylerini verir.

2.2 Düz Çift Parabolik Kuşatmada Eksiton Bağlanma Enerjileri

Bu bölümde aynı yapıda eksiton bağlanma enerjileri hesaplanmıştır. Çift düz parabolik kuyuda eksiton Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi verilir:

$$H = \frac{(\vec{P}_e + \frac{e\vec{A}_e}{c})^2}{2m_e^*} + \frac{(\vec{P}_h - \frac{e\vec{A}_h}{c})^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + V_e(\rho_e, \phi_e) + V_h(\rho_h, \phi_h) \quad 2-21$$

Hamiltoniyedeki e ve h alt indisleri sırasıyla elektron ve hole ait sabit ya da parametreleri belirtmektedir, üçüncü terim ise elektron ve hol arasındaki Coulomb etkileşiminden gelen katkı terimidir. Burada ,

$$|\vec{r}_e - \vec{r}_h| = [\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\phi_e - \phi_h) + z^2]^{1/2} \quad 2-22$$

olup elektron-hol arası mesafenin büyüklüğünü verir ($z = z_e - z_h$).

Hamiltoniyene dikkat edilirse Coulomb katkı terimi dışındaki terimler, elektron ve holün ayrı ayrı kinetik ve potansiyel enerji terimleridir. Elektron ve holün kuşatma potansiyelleri aşağıdaki gibidir:

$$V_e(\rho_e, \phi_e) = \begin{cases} V_{oe} \left(\frac{\rho_e}{R}\right)^2, & |\rho_e| \leq R \\ 0, & |\rho_e| > R \end{cases} \quad 2-23$$

$$V_h(\rho_h, \phi_h) = \begin{cases} V_{oh} \left(\frac{\rho_h}{R}\right)^2, & |\rho_h| \leq R \\ 0, & |\rho_h| > R \end{cases} \quad 2-24$$

Eksiton probleminin çözümü için de daha önce elektron için yapıldığı gibi, Hamiltoniyenin, özdeğer denkleminde yerine yazılarak denklemin çözülmesi gerekmektedir. Ancak dalga fonksiyonlarını belirleyebilmek için Hamiltoniyenin tam olarak belirlenmiş olması gerekir. Bu nedenle elektron ve holün kuyu yarıçapına göre olası tüm konumları dikkate alınmalıdır. Çünkü Hamiltoniyede yazılacak potansiyeller, elektron ve holün bulunduğu bölgeye göre değişmektedir. Elektron ve holün bulunabileceği durumlar aşağıda verilmiştir:

$$\begin{array}{ll}
i. & 0 \leq \rho_e \quad \Lambda \quad \rho_h \leq R \\
ii. & \rho_e > R \quad \Lambda \quad \rho_h \leq R \\
iii. & \rho_e \leq R \quad \Lambda \quad \rho_h > R \\
iv. & \rho_e \quad \Lambda \quad \rho_h > R
\end{array} \tag{2-25}$$

Bu durumların her biri için Hamiltoniyende potansiyel değiştirilerek dört farklı çözüm elde edilmiştir.

Denklem 2-21 ile verilen Hamiltoniyenin kullanılarak elde edilen özdeğer denklemi, değişkenlerine ayrılamayan bir diferansiyel denklemdir ve analitik olarak çözülemez. Bunun nedeni Hamiltoniyedeki etkileşim terimidir. Öyleyse dalga fonksiyonu için bir çözüm önerilebilir. Eğer genel çözüm,

$$\Psi_{ex}(\rho_e, \rho_h, \phi_e, \phi_h, z_e, z_h) = \Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e) \Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h) e^{-\lambda |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \tag{2-26}$$

biçiminde önerilirse problem çözülebilir. Burada $\Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e) \Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h)$ fonksiyonu, Hamiltoniyenden etkileşim terimi kaldırılarak bulunan diferansiyel denklemin analitik çözümüdür ve tek bir elektron ve holden oluşan etkileşimsiz bir sistemi tanımlar. Ancak etkileşim teriminin hesaba katılması gerekir. Bu nedenle $\Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e) \Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h)$ fonksiyonu öyle bir terimle çarpılmalıdır ki elektron ve holden aralarındaki mesafeyle hızla azalan bir fonksiyon elde edilebilsin. Bu terim $e^{-\lambda |\vec{r}_e - \vec{r}_h|}$ olarak seçilmiştir. Burada λ varyasyon parametresidir. Genel çözümdeki $\Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e)$ dalga fonksiyonu bir önceki bölümde bulunmuştu. Aynı çözüm, sadece elektron sabitleri holden sabitleri ile değiştirilerek holden için de yazılabilir dolayısıyla $\Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h)$ fonksiyonu da bilinmektedir.

Eksiton dalga fonksiyonları kısaca elektron ve holden bulunduğu konuma göre aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$\Psi_{ex} = \begin{cases} \Psi_{ex1}, & 0 \leq \rho_e \quad \Lambda \quad \rho_h \leq R. \\ \Psi_{ex2}, & \rho_e > R \quad \Lambda \quad \rho_h \leq R \\ \Psi_{ex3}, & \rho_e \leq R \quad \Lambda \quad \rho_h > R \\ \Psi_{ex4}, & \rho_e \quad \Lambda \quad \rho_h > R \end{cases} \tag{2-27}$$

Burada dalga fonksiyonları aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} \Psi_{ex1}(\rho) = N_1 & \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega'_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega'_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \\ & \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega'_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega'_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\ & \text{LaguerreL}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega'_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega'_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \\ & \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] \end{aligned} \quad 2-28$$

$$\begin{aligned} \Psi_{ex2}(\rho) = N_2 & \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega'_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \\ & \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\ & \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega'_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega'_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \\ & \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] \end{aligned} \quad 2-29$$

$$\begin{aligned} \Psi_{ex3}(\rho) = N_3 & \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega'_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \\ & \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega'_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega'_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\ & \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \\ & \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] \end{aligned} \quad 2-30$$

$$\begin{aligned} \Psi_{ex4}(\rho) = N_4 & \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \\ & \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\ & \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \\ & \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] \end{aligned} \quad 2-31$$

Dalga fonksiyonlarındaki N_1, N_2, N_3, N_4 katsayıları sınır koşullarından bulunurlar.

$$N_1 = N \quad 2-32$$

$$N_2 = N \frac{\text{Exp}\left[-\frac{m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[-\frac{m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \quad 2-33$$

$$N_3 = N \frac{\text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]} \quad 2-34$$

$$N_4 = N \left\{ \frac{\text{Exp}\left[-\frac{m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[-\frac{m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \right. \\ \left. \frac{\text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]} \right\} \quad 2-35$$

N sabiti ise normalizasyon koşulundan bulunur ve,

$$N^{-2} = -4\pi \frac{d}{d\lambda} (K + L + M + P) \quad 2-36$$

biçiminde verilir. Detaylı çözüm Ek-3 te verilmiştir.

Burada K, L, M, P normalizasyon koşulundaki integrallerdir.

Eksiton bağlanma enerjisi, elektron ve holün toplam enerjilerinden, eksiton sisteminin toplam enerjisi çıkarılarak elde edilir. Bu çıkarma işlemi sonucunda fark enerjisi pozitif bulunur.

Ancak bağlanma enerjisinin çekici bir kuvvetten kaynaklandığı dolayısıyla da negatif işaretli olduğu unutulmamalıdır.

Sistemde etkileşmeyen bir elektron ve holün toplam E enerjisi aşağıdaki gibidir:

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad 2-37$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h^*} + \hbar\omega'_e \left(a'_{01(e)} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega'_h \left(a'_{01(h)} + \frac{1}{2} \right) \quad 2-38$$

Eksiton sisteminin $\langle H(R, B) \rangle$ toplam enerjisi,

$$\langle H(R, B) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad 2-39$$

$$\langle H(R, B) \rangle = \left\{ \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h^*} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_h^*} + \hbar\omega'_e \left(a'_{01(e)} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega'_h \left(a'_{01(h)} + \frac{1}{2} \right) + \frac{2e^2}{\epsilon_o} \frac{(K + L + M + P)}{\frac{d}{d\lambda}(K + L + M + P)} \right\} \quad 2-40$$

Buna göre $E_b(R, B)$ bağlanma enerjisi,

$$E_b(R, B) = E - \langle H(R, B) \rangle \quad 2-41$$

$$E_b(R, B) = -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\mu^*} - \frac{2e^2}{\epsilon_o} \frac{(K + L + M + P)}{\frac{d}{d\lambda}(K + L + M + P)} \quad 2-42$$

bulunur.

$E_b(R, B)$ bağlanma enerjisi Rydberg sabiti cinsinden yazılabilir ve,

$$E_b(R, B) = -(\lambda a_B)^2 - 4a_B \frac{(KK + LL + MM + PP)}{\frac{d}{d\lambda}(KK + LL + MM + PP)} \quad 2-43$$

olur. KK,MM,LL,PP integralleri Ek-3 de verilmiştir. Görüldüğü gibi bağlanma enerjisi λ varyasyon parametresini içermektedir. Eksiton bağlanma enerjisinin taban durumundaki değeri, λ ya göre bağlanma enerjisinin maksimum olduğu değerdir ve ,

$$\frac{d}{d\lambda} E_b(R, B) = 0 \quad 2-44$$

koşulunu sağlar

Bu aşamada elde edilen 2-43 denkleminde R ve B ye değerler verilerek 2-44 denklemini sağlayan λ değerleri bulunmak sureti ile $E_b(R, B)$ bağlanma enerjileri sayısal olarak hesaplanır. Bu hesaplamalarda *Mathematica*TM ile yazılan program kullanılmıştır.

Bağlanma enerjisinde yer alan a_b ve diğer parametre ya da sabitler Ek-1 ve Ek-2 de verilen tablolarda gösterilmiştir.

3 BULGULAR

Bu bölümde, birinci kısımda kuantum telinin yarıçapı sabit tutularak, Al konsantrasyonunun %20 ile %40 olduğu durumlarda, farklı manyetik alanların eksiton bağlanma enerjileri üzerindeki etkileri araştırılmış ve manyetik alana karşı bağlanma enerjisi grafikleri çizilmiştir. İkinci kısımda ise manyetik alan değeri sabit tutularak, telin yarıçapı değiştirildiğinde eksiton bağlanma enerjilerindeki değişim incelenmiş, tel yarıçapına karşı bağlanma enerjileri grafiği çizilmiştir.

$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ telinde $x = 0.2$ alındığında elektron için potansiyel bariyeri $168.5meV$ yüksekliğinde, $x = 0.4$ alındığında ise $347.52meV$ yüksekliğinde olmaktadır. Bu sonuç,

$$V_o = Q_e(1.36x + 0.22x^2)eV \quad 3-1$$

eşitliği kullanılarak bulunmuştur. Kuşatma potansiyelini, x Al konsantrasyonuna bağlayan bu ifade Branis, Gang ve Bajaj' ın çalışmalarından alınmıştır[8].

Bu çalışmada elektronun etkin kütlesi $m_e^* = 0.067m_o$, hol için ise, ağır holün etkin kütlesi olan $m_h^* = 0.135m_o$ değeri alınmıştır. Ağır holün etkin kütlesi,

$$m_h^* = \frac{2}{3}m_h^{*-1}(x, y) + \frac{1}{3}m_h^{*-1}(z) \quad 3-2$$

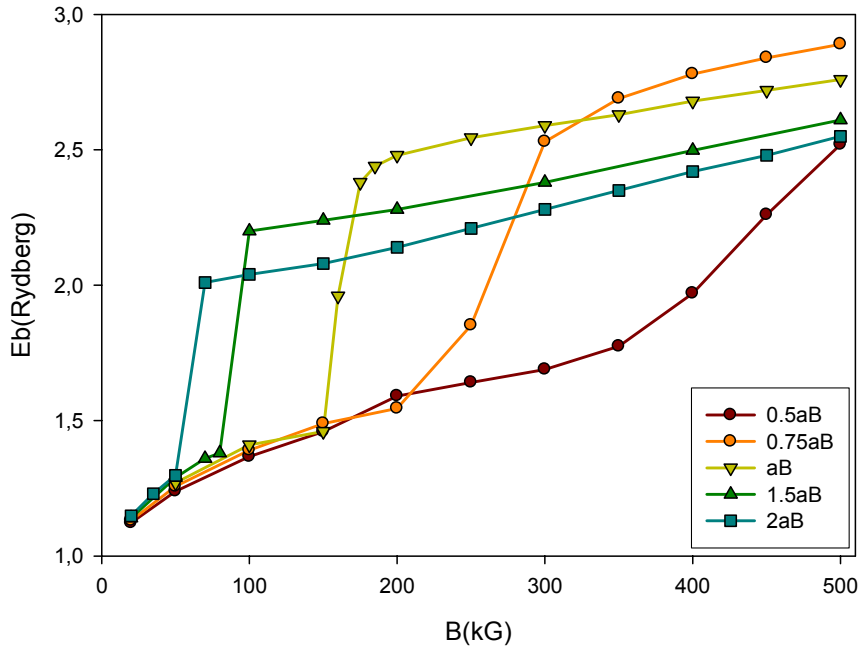
eşitliği ile hesaplanmıştır. Burada holün xy doğrultusundaki etkin kütlesi $m_h^*(x, y) = 0.1m_o$, z doğrultusundaki etkin kütlesi ise $m_h^*(z) = 0.45m_o$ alınmıştır [8].

Hesaplamalarda kullanılan diğer sabitler Ek-1 de verilmiştir.

3.1 Manyetik Alanın Bağlanma Enerjileri Üzerine Etkileri

3.1.1 $x=0.2$ için veriler

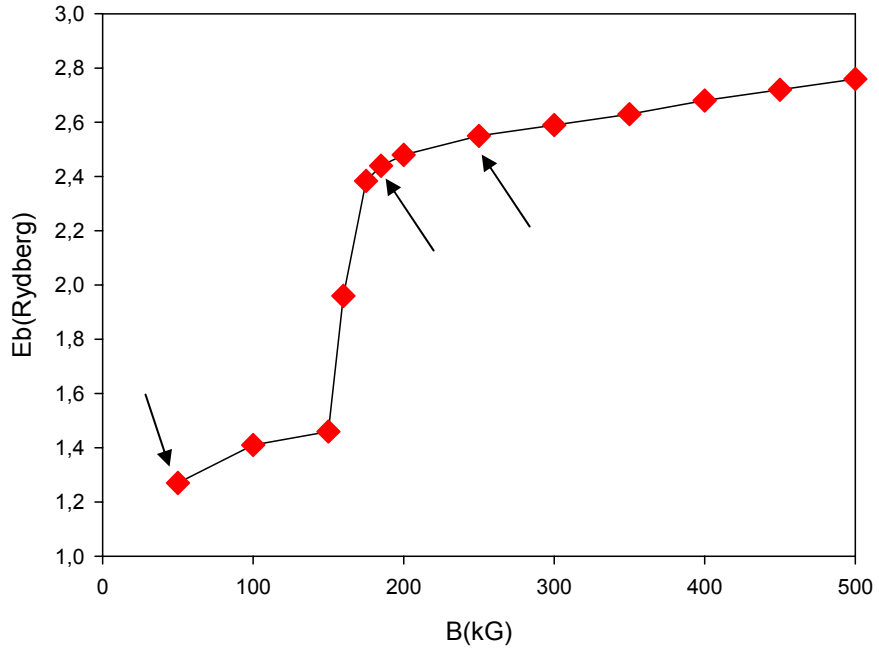
Aşağıdaki grafikte, farklı yarıçaplarda seçilen kuantum teli için uygulanan manyetik alan $20kG$ ’tan başlanarak $500kG$ ’a kadar artırılmış ve buna karşılık gelen bağlanma enerjileri gösterilmiştir.



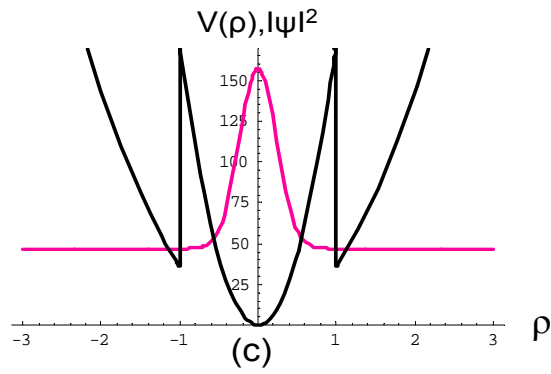
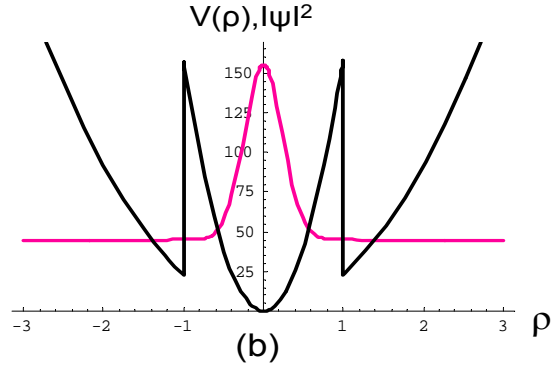
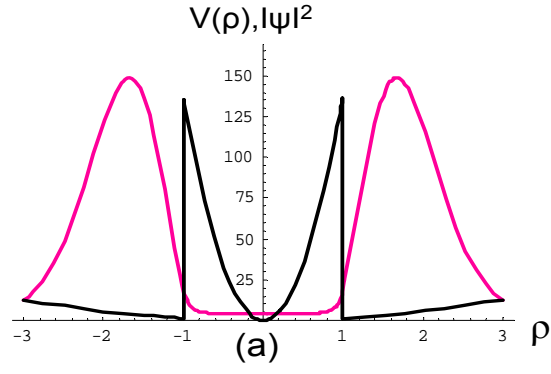
Şekil 19: $x = 0.2$ için eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi.

Grafiğe dikkat edilirse beş farklı eğride de belirli bir manyetik alan değerinden sonra bağlanma enerjisinde ani bir artış görülmektedir. Bu artışın, tel yarıçapının büyük değerleri için, daha küçük manyetik alanlarda gerçekleştiği de görülmektedir. Örneğin grafiğe bakılırsa tel yarıçapı a_B iken ani enerji artışı $150kG$ civarında bir manyetik alanda, $2a_B$ iken $50kG$ civarında bir manyetik alanda gerçekleşmektedir. Bir başka dikkat edilecek nokta ise enerji artışından önce ve sonra bağlanma enerjisinin manyetik alanla hemen hemen doğrusal olarak değişmesidir, dolayısıyla manyetik alan değerinin bağlanma enerjisini artırdığı söylenebilir. Örnek olarak tel yarıçapı a_B iken sırasıyla $100kG$ ve $300kG$ manyetik alandaki enerjilere bakılırsa birisinde $1.3R_d$ değerinde ise $2.5R_d$ civarında olduğu görülür.

Şekil-19 da verilen grafikteki sonuçları doğru yorumlayabilmek için elektronun, çift parabolün neresinde yerleştiğini bilmemiz gerekmektedir. Dikkat edilirse grafikteki tüm eğriler aynı davranışı göstermektedir. Bu nedenle aşağıda yarıçapı a_B olan telin, manyetik alanla değişimini veren grafik ve elektronun üç ayrı bölgede çizilmiş olasılık eğrileri verilmiştir. Bir tek eğri için davranışın nedenleri açıklanabilirse, tüm durumlar için bir genelleştirme yapılabilir.



Şekil 20: $x = 0.2$ için a_B yarıçaplı telde eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi.



Şekil 21: Şekil 20 de oklarla gösterilen noktalar için olasılık yoğunluğu ve kuyu profili.
 (a) $B = 50$ kG (b) $B = 200$ kG ve (c) $B = 250$ kG.

Şekil-21 deki grafiklerin her biri, elektron dalga fonksiyonunun karesi alınarak çizilmiştir. Bilindiği gibi dalga fonksiyonunun karesi, elektronun olasılık yoğunluğunu vermektedir. Bu nedenle yorum yapılırken olasılık yoğunluğuna bakılarak elektron kuyu içerisinde ya da dışarısında biçiminde ifadeler kullanılmıştır.

Elektronun, Şekil-21 (a) da, manyetik alanın $50kG$ değeri için, hemen hemen kuyu dışında olduğu, (b) de ise manyetik alanın $200kG$ değeri için, büyük oranda kuyu içerisine sızmış olduğu görülür. Şekil-20' ye tekrar bakılırsa $50kG$, enerji artışından önceki manyetik alan, $200kG$ ise enerji artışından sonraki manyetik alan değeridir. $250kG$ da ise elektron tamamen içeri girmiştir. Özetle, düşük manyetik alanlarda, elektron kuyu dışında iken, manyetik alan artırılırsa bağlanma enerjisi de lineer olarak artar ancak belli bir manyetik alan değerine ulaşıldığında bağlanma enerjisinde bir sıçrama görülür. Bundan sonra manyetik alan artırılmaya devam edilse de, bağlanma enerjisi bu kritik değerden önceki gibi manyetik alan ile lineer değişir. Enerjideki bu sıçrama telin yarıçapına (ya da kuyu genişliğine) bağlı olarak farklı manyetik alan değerlerinde gerçekleşir. Elektronun, bu kritik manyetik alan değerinden sonra kuyu içerisine geçtiği durum için, bundan sonraki tartışmalarda 'geçiş' ifadesi kullanılmıştır.

Geçiş olayının nasıl gerçekleştiğinin anlaşılması için çok düşük manyetik alan ile başlanabilir. Başlangıçta, bu çalışmada seçilen kuantum telinde, elektronun uzaysal kuşatma ve manyetik alan nedeniyle çift parabol etkisinde kaldığı belirtilmişti. Bu sistemde, manyetik alan ne kadar küçükse, manyetik alanın oluşturacağı parabol de o kadar yayvan olmaktadır. Dolayısıyla böyle bir durumdaki elektron dıştan geniş bir parabol ile kuşatılırken, bu parabolün içinde yer alan uzaysal kuşatmayı da görmektedir. Ancak elektronun bu kadar geniş parabol içerisinde, düşük bir enerji ile hareket ederken, içteki $168meV$ yüksekliğindeki kuyunun içerisine sızması için bir nedeni yoktur. Bu nedenle elektron, düşük manyetik alanlarda dış parabol içerisinde hareket eder. Bu bölgede elektronun bir holle yapacağı bağlanmada yarıçap büyük, bunun sonucu olarak da bağlanma enerjileri küçük olacaktır. Eğer bu durumda iken manyetik alan artırılmaya başlanırsa dıştaki parabol daralır, elektron ve hol birbirine yaklaşacağından eksiton yarıçapı küçülürken bağlanma enerjisi artacaktır. Sonuç olarak düşük manyetik alanlarda, kritik manyetik alan değerine kadar bu problem, harmonik osilatör problemine benzer ve bağlanma enerjisi manyetik alan ile lineer değişir. Bu lineer değişim, Şekil-19 da eğrilerin her birinde geçişlerden önce görülmektedir.

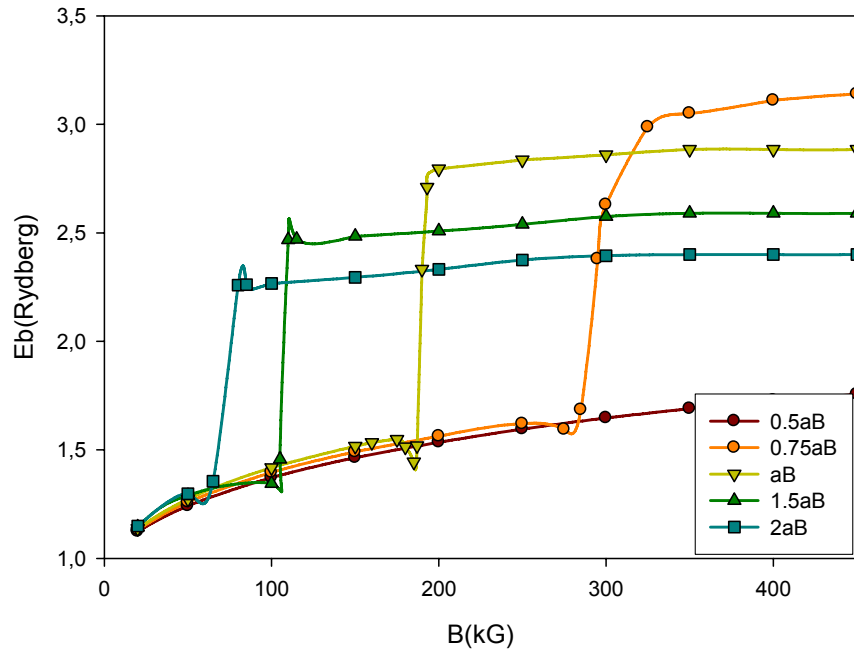
Manyetik alanın yeterince artırıldığı durumda, dıştaki parabol daraldıkça elektron içteki kuyu etkilerini daha fazla hissetmeye başlamıştır. Elektronun dış parabol içerisindeki enerji düzeyleri ile iç paraboldeki enerji düzeylerinden bir tanesi çakıştığı anda geçiş gerçekleşir ve elektron içeri sızar. Bu durumda içteki parabol ile dıştaki parabolün toplamı olan tek bir parabol vardır ve elektron bu parabolik kuyu içerisinde yer almaktadır. Problem tekrar harmonik osilatör problemine

benzemiştir ve geçişten sonraki yüksek manyetik alan değerlerinde, bağlanma enerjisi manyetik alan ile lineer değişmektedir. Bu lineer değişim Şekil-19 da eğrilerin her birinde geçişlerden sonra görülmektedir.

3.1.2 $x=0.4$ için veriler

Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değerinden $x = 0.4$ değerine artırılmasıyla, potansiyel bariyeri $168.5meV$ 'den $347.52meV$ 'e yükselmektedir. Burada da üstte açıklandığı şekilde belli manyetik alan değerinde geçişler gerçekleşmektedir. Ancak bariyerin yüksekliğinin artması nedeniyle elektronun geçiş için daha fazla enerjiye ihtiyacı olacaktır. Bu nedenle aynı yarıçaplı tel için $x = 0.2$ durumundaki geçiş oranla $x = 0.4$ durumundaki geçiş, daha yüksek bir manyetik alan değerinde görülür.

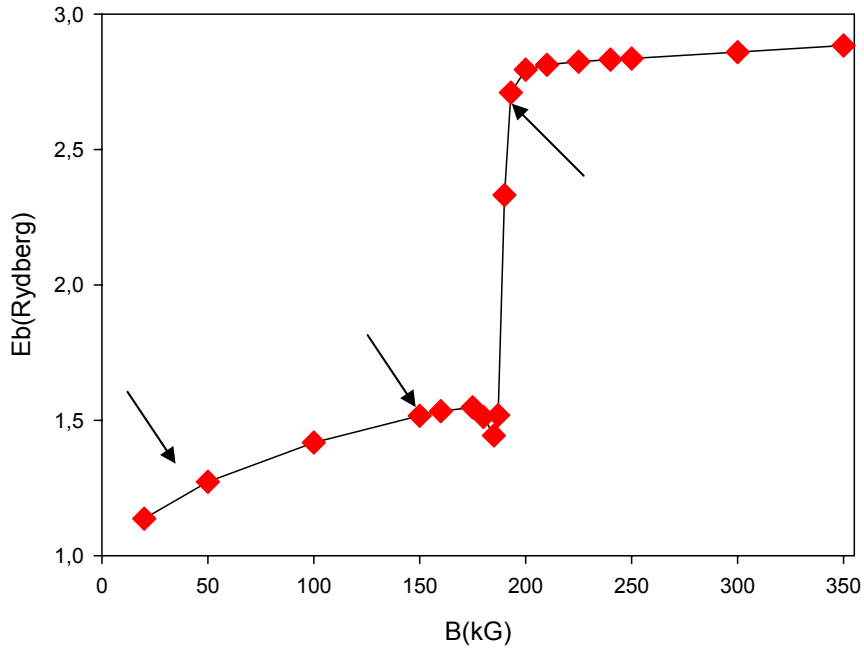
Aşağıdaki grafikte, farklı yarıçaplarda seçilen kuantum teli için uygulanan manyetik alan $20kG$ ' tan başlanarak $450kG$ 'a kadar artırılmış ve buna karşılık gelen bağlanma enerjileri gösterilmiştir.



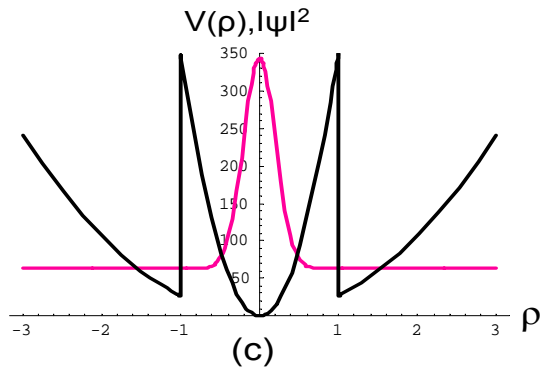
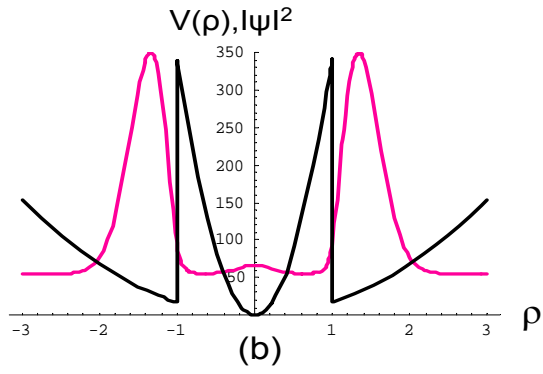
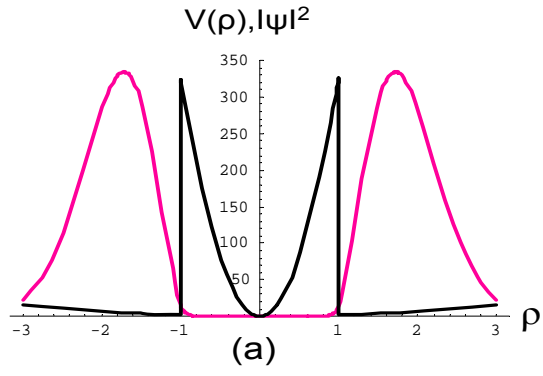
Şekil 22: $x = 0.4$ için eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alanla değişimi.

Burada $x = 0.2$ için bulunan sonuçlarla karşılaştırmak amacıyla tel yarıçapının a_B olduğu duruma bakılırsa geçişin, $x = 0.2$ durumunda manyetik alan $150kG$ civarında iken, $x = 0.4$ durumunda ise manyetik alan $200kG$ civarında iken gerçekleştiği görülmektedir. Benzer şekilde tüm yarıçaplarda geçişlerin $x = 0.4$ durumunda daha büyük manyetik alan değerlerinde gerçekleştiği, Şekil-19 ve Şekil-22 karşılaştırılarak yapılabilir. Aşağıda $x = 0.4$ durumu için de, yarıçapı a_B olan telin, manyetik alanla değişimini veren grafik ve elektronun üç ayrı bölgede çizilmiş olasılık yoğunluğu grafikleri verilmiştir.

Burada da Şekil-22 de verilen grafikteki sonuçları doğru yorumlayabilmek için elektronun, çift parabolün neresinde yerleştiğini bilmemiz gerekmektedir. Grafikteki tüm eğriler aynı davranışı gösterdiğinden, aşağıda yarıçapı a_B olan telin, manyetik alanla değişimini veren grafik ve elektronun üç ayrı bölgede çizilmiş olasılık eğrileri verilmiştir. Bir tek eğri için davranışın nedenleri açıklanabilirse, yine tüm durumlar için bir genelleştirme yapılabilir.



Şekil 23: $x = 0.4$ için a_B yarıçaplı telde eksiton bağlanma enerjisinin manyetik alana göre değişimi.



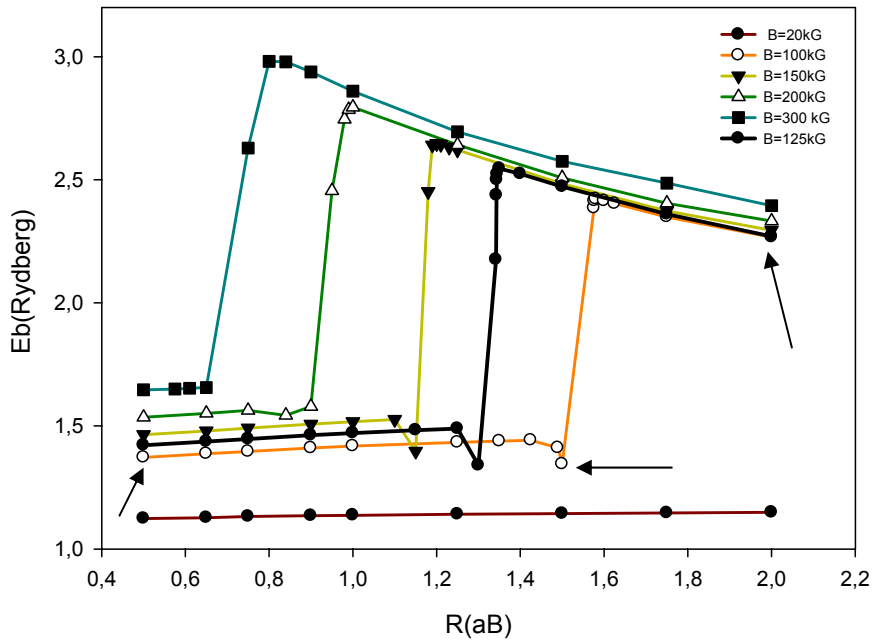
Şekil 24: Şekil 23 de oklarla gösterilen noktalar için olasılık yoğunluğu ve kuyu profili.
 (a) $B=50$ kG (b) $B=160$ kG ve (c) $B=200$ kG

Elektronun, Şekil-24 (a) da, manyetik alanın $50kG$ değeri için, hemen hemen kuyu dışında olduğu, (b) de manyetik alanın $160kG$ değeri için, kuyu içerisine sızmaya başladığı, (c) de ise manyetik alanın $200kG$ değeri için tamamen kuyu içerisinde olduğu görülür. Şekil-23' e bakılırsa $50kG$, enerji artışından önceki manyetik alan, $200kG$ ise enerji artışından sonraki manyetik alan değeridir. Özetle $x = 0.2$ durumunda olduğu gibi, düşük manyetik alanlarda, elektron kuyu dışında iken, manyetik alan artırılırsa bağlanma enerjisi de lineer olarak artar ancak belli bir manyetik alan değerine ulaşıldığında bağlanma enerjisinde bir sıçrama görülür. Bundan sonra manyetik alan artırılmaya devam edilse de, bağlanma enerjisi bu kritik değerden önceki gibi manyetik alan ile lineer değişir. Enerjideki bu sıçrama telin yarıçapına bağlı olarak farklı manyetik alan değerlerinde gerçekleşir ve bu enerji sıçramasının nedeni Şekil-24 de görüldüğü gibi elektronun kuyu içerisine geçmesidir.

3.2 Kuyu Yarıçapının Bağlanma Enerjileri Üzerine Etkileri

3.2.1 $x=0.2$ için veriler

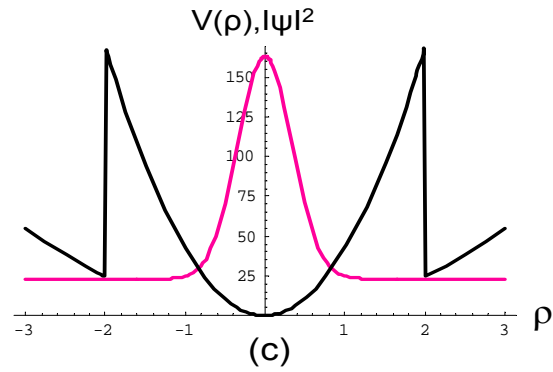
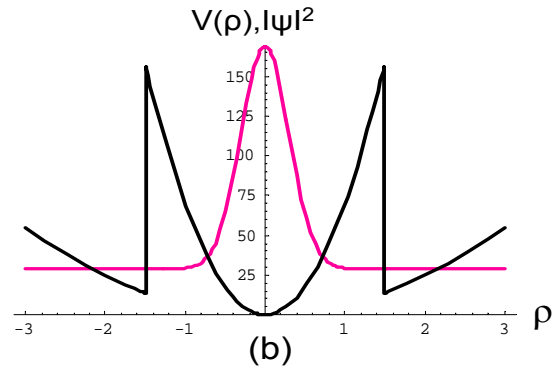
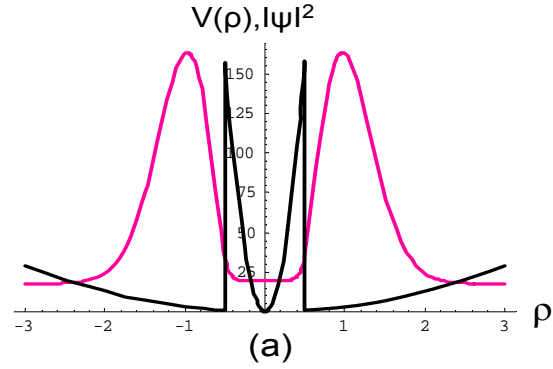
Aşağıdaki grafikte, farklı manyetik alanların uygulandığı kuantum teli için, tel yarıçapı $0.5a_B$ ' den başlanarak $2a_B$ 'ye kadar artırılmış ve buna karşılık gelen bağlanma enerjileri gösterilmiştir.



Şekil 25: $x = 0.2$ için eksiton bağlanma enerjisinin tel yarıçapı ile değişimi.

Grafiğe dikkat edilirse beş farklı eğride de belirli bir yarıçap değerinden sonra bağlanma enerjisinde ani bir artış görülmektedir. Bu ani artışın, büyük manyetik alan değerleri için, daha küçük yarıçaplarda gerçekleştiği de görülmektedir. Örneğin grafiğe bakılırsa manyetik alan $300kG$ iken ani enerji artışı $0.7a_B$ civarında bir yarıçapta, $100kG$ iken $1.5a_B$ civarında bir yarıçapta gerçekleşmektedir. Bir başka dikkat edilecek nokta ise enerji artışından sonra bağlanma enerjisinin yarıçapla neredeyse lineer olarak değiştiğidir (bağlanma enerjisi azalmaktadır). Örnek olarak manyetik alan $300kG$ iken sırasıyla $0.8a_B$ ve $2a_B$ yarıçaplarındaki bağlanma enerjilerine bakılırsa birisinde $3R_d$, diğerinde ise $2.5R_d$ civarında olduğu görülür.

Şekil-25 de verilen grafikteki sonuçları doğru yorumlayabilmek için bölüm 3.1 de yapıldığı gibi burada da elektronun, çift parabolün neresinde yerleştiğini bilmemiz gerekmektedir. Dikkat edilirse grafikteki tüm eğriler aynı davranışı göstermektedir. Bu nedenle aşağıda manyetik alanın $100kG$ olduğu durumda (Şekil-25 te oklarla işaret edilen noktalarda) elektronun üç ayrı bölgede çizilmiş olasılık eğrileri ve kuyu profilleri verilmiştir. Yine bir tek eğri için davranışın nedenleri açıklanabilirse, tüm durumlar için bir genelleştirme yapılabilir.



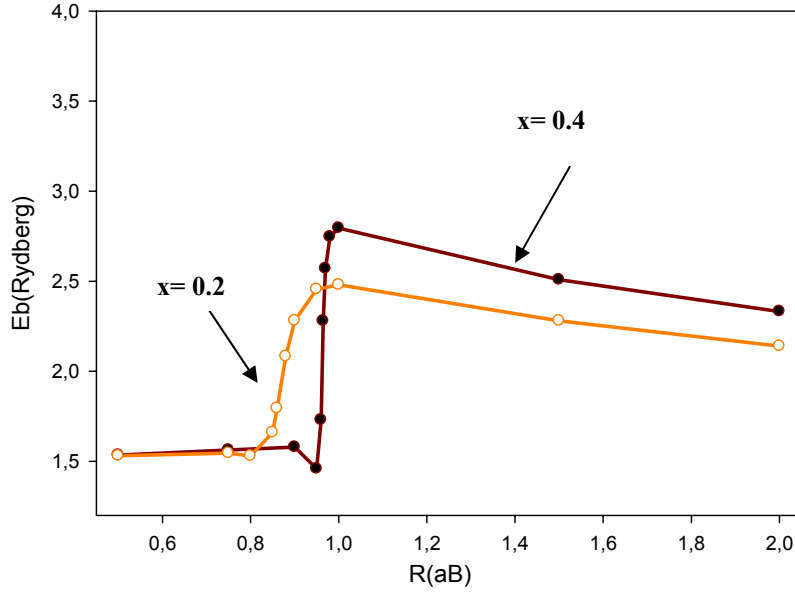
Şekil 26: Şekil 25 te oklarla gösterilen noktalar için olasılık yoğunluğu ve kuyu profili ($B=100KG$). (a) $r=0.5a_B$ (b) $r=1.5a_B$ ve (c) $r=2a_B$

Elektronun, Şekil-26 (a) da, yarıçapın $0.5a_B$ değeri için, hemen hemen kuyu dışında olduğu, (b) de ise yarıçapın $1.5a_B$ değeri için, büyük oranda kuyu içerisine sızmış olduğu görülür. (c) de ise yarıçapın $2a_B$ değeri için tamamen kuyu içerisindedir. Şekil-25' e tekrar bakılırsa, $B=100kG$ için, $0.5a_B$ enerji artışından önceki yarıçap, $1.5a_B$ enerji artışı sırasındaki yarıçap, $2a_B$ ise enerji artışından sonraki yarıçap değeridir. Öyleyse, düşük yarıçaplarda, elektron kuyu dışında iken, yarıçap artırılırsa bağlanma enerjisi de lineer olarak artar ancak belli bir yarıçap değerine ulaşıldığında bağlanma enerjisinde bir sıçrama görülür. Bundan sonra yarıçap artırılmaya devam edilirse, bağlanma enerjisi bu kez yarıçapla lineer olarak azalır. Bunun nedeni daha büyük yarıçaplı kuyu içerisinde bulunan elektron ve holün daha büyük bir yarıçapla bağlanmasıdır. Şekil-25 de görüldüğü gibi enerjideki sıçrama manyetik alana bağlı olarak farklı yarıçap değerlerinde gerçekleşir. Son olarak Şekil-25 te $B=20kG$ için geçiş görülmemektedir. Ancak buraya kadar olan bulgulardan, bu değerde geçişin daha yüksek kuyu yarıçaplarında gerçekleşmesi beklenmektedir.

Özetlenirse, sabit bir manyetik alan altında, kuyu yarıçapı artırılırsa belli bir yarıçap değerinden sonra elektron kuyu içerisine geçmektedir ve bu geçiş olayının ilk olarak en büyük manyetik alanda en son ise en düşük manyetik alanda gerçekleşmesi beklenmektedir. Bunun nedeni daha önce de bahsedildiği gibi düşük manyetik alanlarda dıştaki parabolün yayvan olması ve elektronun kuyu etkilerini görebilmesi için kuyu yarıçapının büyük olması gerektiğidir. Bu durumda düşük manyetik alan altında, yarıçap artırılırsa içteki parabol dıştaki parabole yaklaşacağından elektron kuyu etkilerini görmeye başlar.

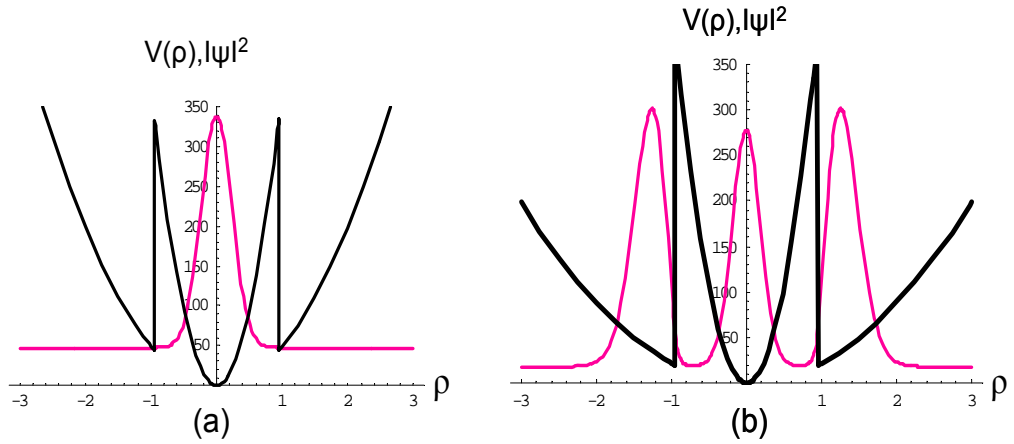
3.2.2 $x=0.4$ için veriler

Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ olduğu durumda ise, $x = 0.2$ için yapılan yorumların tümü geçerlidir yalnızca daha önce bahsedildiği gibi potansiyel bariyerinin daha yüksek olması nedeniyle geçişler daha büyük enerjilerde gerçekleşmektedir. Şekil 27 de karşılaştırmak amacıyla $x = 0.2$ ve $x = 0.4$ için manyetik alanın $200kG$ değerindeki bağlanma enerjisi-yarıçap grafikleri üst üste çizilmiştir. Beklendiği gibi $x = 0.4$ de, kuyu içerisine giren elektron $x = 0.2$ deki elektrona göre daha büyük enerjiye sahiptir. Ayrıca grafiğin yatay eksenine dikkat edilirse aynı bağlanma enerjilerine sahip olmalarına karşın, bariyer yüksek olduğunda ($x = 0.4$) geçişler daha büyük yarıçaplarda gerçekleşmektedir.



Şekil 27: $x = 0.4$ ve $x=0.2$ için eksiton bağlanma enerjisinin tel yarıçapı ile değişimi.

Burada dikkat edilirse $x=0.4$ için çizilen grafikte geçiş sırasında bağlanma enerjisinde bir azalma görülmektedir. Bunun anlaşılabilmesi için tam bu noktada elektron ve holün dalga fonksiyonları çizilmiştir. Şekil-28 de görüldüğü gibi elektron kuyu içerisine geçmişken hol kuyu dışında sayılabilir. Kısaca elektron ve holün aynı anda geçişi gerçekleşmediği söylenilebilir.



Şekil 28: (a) Elektron olasılık fonksiyonu ve kuyu profili. (b) Hol olasılık fonksiyonu ve kuyu profili.

4 TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, düz parabolik bir uzaysal kuşatma kaynaklı potansiyel ve manyetik alan uygulanarak oluşturulan ikinci bir parabolik kuşatmayı içeren bir kuantum sisteminde, eksiton bağlanma enerjileri hesaplanmıştır.

Bağlanma enerjilerinin hesaplanmasında, etkin kütle yaklaşımı ve Varyasyon tekniği kullanılmıştır. Uzaysal kuşatmanın parabolik olması da sistemin Hamiltoniyen'ine manyetik alan terimi ile benzer katkı getirdiğinden çözümde kolaylık sağlamıştır. Sonuçta sistemdeki yarıçap ve manyetik alan, ayarlanabilir parametreler olduklarından bağlanma enerjisinin bu parametreler yardımı ile değiştirilebileceği görülmüştür.

Veriler, $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ alaşımında Al konsantrasyonu $x = 0.2$ ve $x = 0.4$ olmak üzere iki farklı değerde seçilerek alınmıştır. Böylece iki farklı parabolik potansiyel kuyusunda çalışılmış ve bariyer yüksekliklerinin, sistemin özellikleri üzerindeki etkileri karşılaştırılabilmiştir. $x = 0.2$ olduğu durumda bir B manyetik alanı altında, kuyu içerisine sızan bir elektrona, aynı manyetik alan altında $x = 0.4$ durumunda, kuyu içerisine sızabilmesi için daha fazla enerji verilmesi gerektiği beklentilere de uygun olarak gözlenmiştir.

Bu çalışmanın ortaya koyduğu en önemli sonuç, benzer kuşatmalar ile karşılaştırıldığında (örneğin silindirik kare kuyu) daha önce hiç gözlenmemiş bir bağlanma enerjisi karakteri ortaya çıkarmasıdır. Bağlanma enerjisinin manyetik alana veya yarıçapa bağlı grafiklerinde ortaya çıkan bu durum, bağlanma enerjisinin ani sıçramalar yapmasıdır. Bu sıçramaların büyüklüğü $\approx 1.5R_d$ civarındadır ve sıçramaların olduğu yer, x değerinin, B'nin ve R'nin fonksiyonu olarak kontrol edilebilmektedir. Daha önce çalışılmış olan sistemlerde görülmeyen bu durum, ilginç uygulama alanlarında kullanılabilir. Bu nedenle bu çalışmaların genişletilerek, soğurma hesaplarının yapılması ve deneysel olarak ölçülmesi büyük önem taşımaktadır.

5 KAYNAKLAR

- [1] The Feynman Lectures on Physics, Volume III, R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, 3. Baskı, California Institute of Technology, 1966
- [2] Çevremizdeki Fizik, N. Balkan, A. Erol, 1. Baskı, Tübitak, 2005.
- [3] Quantum Wells, Wires and Dots, Paul Harrison, The University of Leeds, UK, John Wiley & Sons, 2000.
- [4] E. Kasapoğlu, U. Yeşilgül, H. Sarı and İ. Sökmen, J. Phys.: Condens. Matter 18(2006)6263-6271.
- [5] H. D. Karki, S. Elagoz, and H. Kaya, Chinese Journal of Physics, Vol. 42, No. 2, April 2004.
- [6] Pablo Villamil, Carlos Cabra and N. Porrás-Montenegro, J. Phys.: Condens. Matter 17(2005)5049-5058.
- [7] Jerry W. Brown and Harold N. Spector, Physical Review B, Volume 35, number 6, 20 August 1986.
- [8] Gang Li, Spiros V. Branis, and K. K. Bajaj, J. Appl. Phys. 77 (3), 1 February 1995.
- [9] Yüksek Lisans Tezi, M. Osman USLU, Danışman: Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ, Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Bil. Enstitüsü, Haziran 2006.
- [10] W. Q. Chen, S. M. Wang, T. G. Andersson, and J. Thordson, Physical Review B, 15 November 1993.
- [11] Semiconductor Physics And Devices, Neamen, 3rd Ed [McGrawHill 2003].
- [12] Fundamentals of Solid-State Electronics, Chih-Tang Sah, 4. Baskı, 1994.
- [13] Katuların Fiziği, Richard Turton, 3. Baskı, 2005.
- [14] Lectures on the Electrical Properties of Materials, L. Solymar, D. Walsh, Oxford Science Publications, 4. Baskı, 1987.
- [15] Semiconductors, R.A. Smith, Cambridge at the University Press 1959.
- [16] Quantum Processes in Semiconductors, B. K. Ridley, University of Essex, Clarendon Press Oxford 1982.
- [17] Quantum Heterostructures Microelektronics and Optoelektronics, Vladimir V. Mitin, V. A. Kochelap, M.A. Strosio, Cambridge University Press, 1999.
- [18] Investigation of Long-wavelength (GaInNAs 2.3 μm) Indium Rich Highly Strained Quantum Wells on InP Substrates, M. Sc. Thesis in Engineering Physics By Ebru BAKIR Supervisor: Prof. Dr. Beşire GÖNÜL, 2006.
- [19] Condensed Matter Physics, M. P. Marder, University of Texas at Austin, 1960.

6 ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Songül KUTLU

Doğum Yeri-Yılı : İstanbul-1978

Medeni Durumu : Bekar

Lisans : C. Ü. Fen Edebiyat Fak.
Fizik Böl. (1999-2004)

Yüksek Lisans : C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim
Dalı(2005-2007).

Yayımlar :**1.**Parabolik Potansiyel ve Dış Manyetik Alan Etkisinde Eksitonik Bağlanma Enerjisinin Hesaplanması (poster sunum, Türk Fizik Derneği 24. Uluslararası Fizik Kongresi, 28-31 Ağustos 2007).
2. Parabolik Potansiyel ve Dış Manyetik Alan Etkisinde Safsızlık Bağlanma Enerjisinin Hesaplanması (sözlü sunum, Türk Fizik Derneği 24. Uluslararası Fizik Kongresi, 28-31 Ağustos 2007).

7 EKLER

Ek-1

Tablo 3: Aşağıdaki sabitler GaAs için verilmiştir.

Boş uzayda elektron kütlesi	$m_o = 9.10956 \times 10^{-28} \text{ gr}$
Elektron etkin kütlesi	$m_e^* = 0.067 m_o$
Hol etkin kütlesi	$m_h^* = 0.135 m_o$
Elektron hol çiftinin indirgenmiş kütlesi	$\mu = 0.0447 m_o$
Dielektrik sabiti	$\epsilon_o = 12.5$
Bohr yarıçapı	$a_B = 148 \text{ \AA}$
Rydberg sabiti	$R_d = 3.898 \text{ meV}$
Elektron potansiyel kuşatması ($x=0.4, Q=0.6$)	$V_o = 347.52 \text{ meV}$

Ek-2

Tablo 4: Parametreler.

Siklotron yarıçapı	$\alpha c = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$
Eksiton Bohr yarıçapı	$a_B = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$
Rydberg sabiti	$R_d = \frac{e^2}{2 \varepsilon_0 a_B}$
Siklotron frekansı (elektron ya da hol, kuyu dışında)	$\omega_{e(h)} = \frac{eB}{m_{e(h)}^* c}$
Siklotron frekansı (kuyu içinde)	$\omega'_{e(h)} = \omega_{e(h)}^2 + \frac{8V_0}{m_{e(h)}^* R^2}$
Elektron ya da hol taban durum enerji özdeğeri (sonsuz silindirik kuyuda)	$a_{0 e(h)} = \frac{\varepsilon_{e(h)}}{\hbar \omega_{e(h)}} - \frac{1}{2}$
Elektron ya da hol taban durum enerji özdeğeri (sonlu silindirik kuyuda)	$a'_{0 e(h)} = \frac{\varepsilon_{e(h)}}{\hbar \omega'_{e(h)}} - \frac{1}{2}$
Değişken (elektron yada hol parabolik kuyu içinde)	$\xi'_{e(h)} = \frac{m_{e(h)}^* \omega'_{e(h)} \rho^2_{e(h)}}{2\hbar}$
Değişken (elektron yada hol parabolik kuyu dışında)	$\xi_{e(h)} = \frac{m_{e(h)}^* \omega_{e(h)} \rho^2_{e(h)}}{2\hbar}$

Ek-3

Çift Parabolik Kuyuda Eksiton Bağlanma Enerjileri

Düz parabolik kuşatma altında eksiton sisteminde Coulomb etkileşme terimi işleme katılmazsa Hamiltoniye,

$$H = \frac{(\vec{P}_e + \vec{A}_e)^2}{2m_e^*} + \frac{(\vec{P}_h - \vec{A}_h)^2}{2m_h^*} + V_e(\rho_e, \phi_e) + V_h(\rho_h, \phi_h) \quad 7-1$$

ile verilir.

Elektron ve holün enerji özdeğerlerinin bulunabilmesi için aşağıdaki özdeğer denklemi çözülmelidir.

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad 7-2$$

Eğer elektron ve hol dalga fonksiyonları aşağıdaki gibi tanımlanırsa, özdeğer denklemi değişkenlerine ayrılabilir ve iki ayrı denklem elde edilir.

$$\psi(\vec{r}) = \Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e)\Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h) \quad 7-3$$

Özdeğer denklemi elektron için,

$$\left\{ \frac{(\vec{P}_e + \vec{A}_e)^2}{2m_e^*} + V_e(\rho_e, \phi_e) \right\} \Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e) = E\Psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e) \quad 7-4$$

hol için,

$$\left\{ \frac{(\vec{P}_h - \vec{A}_h)^2}{2m_h^*} + V_h(\rho_h, \phi_h) \right\} \Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h) = E\Psi_h(\rho_h, \phi_h, z_h) \quad 7-5$$

biçimindedir.

Elektron için dalga fonksiyonu çözümleri yöntem ve teknikler bölümünde verilmişti. Hol için de aynı genel çözüm geçerli olacağından dalga fonksiyonları içeride ve dışarıda olmak üzere her ikisi için de doğrudan yazılabilir.

$$\Psi_i(\xi, \phi, z)_{e(h)} = Ne^{im\phi} e^{ikz} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \text{Laguerre}[a'_{|m|}, |m|, \xi] \quad 7-6$$

$$\Psi_a(\xi, \phi, z)_{e(h)} = Ne^{im\phi} e^{ikz} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1 + |m|, \xi] \quad 7-7$$

Eksiton için genel dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{ex}(\rho, \phi, z) = \Psi_e(\rho, \phi, z) \Psi_h(\rho, \phi, z) e^{-\lambda |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad 7-8$$

biçiminde verilmişti.

Elektron ve hol dalga fonksiyonları bilindiğine göre, eksiton dalga fonksiyonları elektron ve holün bulunduğu konuma göre aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\Psi_{ex1}(\rho) = N_1 \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega'_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega'_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \quad 7-9$$

$$\text{Laguerre}L\left[\frac{\epsilon_e}{\omega'_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega'_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]$$

$$\text{Laguerre}L\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega'_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega'_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]$$

$$\Psi_{ex2}(\rho) = N_2 \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \quad 7-10$$

$$\text{Hypergeometric}U\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]$$

$$\text{Laguerre}L\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]$$

$$\Psi_{ex3}(\rho) = N_3 \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega'_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \quad 7-11$$

$$\text{Laguerre}L\left[\frac{\epsilon_e}{\omega'_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega'_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]$$

$$\text{Hypergeometric}U\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]$$

$$\Psi_{ex4}(\rho) = N_4 \text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right]$$

$$\text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]$$

$$\text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\bar{\rho}_e - \bar{\rho}_h)^2 + z^2}\right]$$
7-12

Dalga fonksiyonlarındaki N_1, N_2, N_3, N_4 katsayıları sınır koşullarından bulunurlar.

Sınır koşulları,

$$\Psi_{iç}(R, \phi, z)_{e(h)} = \Psi_{du}(R, \phi, z)_{e(h)}$$
7-13

$$\left. \frac{\partial \Psi_{iç}(\rho, \phi, z)_{e(h)}}{\partial \rho_{e(h)}} \right|_R = \left. \frac{\partial \Psi_{du}(\rho, \phi, z)_{e(h)}}{\partial \rho_{e(h)}} \right|_R$$
7-14

denklemleri ile verilir. Dalga fonksiyonları bu koşulları sağlamalıdır.

$$N_1 = N$$
7-15

$$N_2 = N \frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}$$
7-16

$$N_3 = N \frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}$$
7-17

$$N_4 = N \left\{ \frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \right\} x$$

$$\left. \frac{\text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega'_h R^2}{4\hbar}\right] \text{Laguerre}L\left[\frac{\epsilon_h}{\omega'_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega'_h}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{Hypergeometric}U\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}\right\} \quad 7-18$$

N sabiti ise normalizasyon koşulundan bulunur.

Normalizasyon koşulu,

$$\int_{\substack{\text{tüm} \\ \text{uzay}}} \Psi^* \Psi d\tau = 1 \quad 7-19$$

ile verilir.

Eksiton için normalizasyon koşulu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex1}^* \Psi_{ex1} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz + \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex2}^* \Psi_{ex2} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz + \right.$$

$$\left. \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex3}^* \Psi_{ex3} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz + \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex4}^* \Psi_{ex4} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \right\} = 1$$

7-20

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \left(\text{Exp}\left[-\frac{m_e^* \omega'_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \omega'_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \text{Laguerre}L\left[\frac{\epsilon_e}{\omega'_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega'_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \right. \\ \left. \text{Laguerre}L\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega'_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega'_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] \right)^2 d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz$$

$$\begin{aligned}
& + N^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e' R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e'}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \\
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R \rho_e \rho_h (\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\
& \quad \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h'}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]^2 d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \\
& + N^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h' R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h'}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \\
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R \rho_e \rho_h (\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e'}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\
& \quad \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]^2 d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \\
& + N^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e' R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e'}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h' R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h'}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \\
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R \rho_e \rho_h (\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{4\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right] \\
& \quad \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]^2 d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz = 1
\end{aligned}$$

7-21

Burada integralleri kolaylaştırmak için Bessel fonksiyonları kullanılmıştır. Bessel fonksiyonlarının integral formu aşağıdaki gibidir:

$$\int_0^{\infty} \frac{\text{Exp}\left[-2\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right]}{\sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}} dz = K_o(\rho_-) I_o(\rho_+) \quad 7-22$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \text{Exp}[-2\lambda\sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}] dz = -\frac{d}{d\lambda} K_o(2\lambda|\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h|) \quad 7-23$$

Denklem 7-21 deki integrallerde 7-22 ve 7-23 ifadeleri yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa integraller aşağıdaki gibi verilebilirler. Burada integraller sırasıyla K, L, M, P olarak adlandırılmışlardır.

$$K = \left\{ \int_0^R \rho_e d\rho_e \text{Laguerre}L^2(a'_{01e}, 0, \xi'_e) \text{Exp}[-\xi'_e] K_o(2\lambda\rho_e) \right. \\ \int_0^{\rho_e} \rho_h d\rho_h \text{Laguerre}L^2(a'_{01h}, 0, \xi'_h) \text{Exp}[-\xi'_h] I_o(2\lambda\rho_h) \\ \int_0^R \rho_e d\rho_e \text{Laguerre}L^2(a'_{01e}, 0, \xi'_e) \text{Exp}[-\xi'_e] I_o(2\lambda\rho_e) \\ \left. \int_{\rho_e}^R \rho_h d\rho_h \text{Laguerre}L^2(a'_{01h}, 0, \xi'_h) \text{Exp}[-\xi'_h] K_o(2\lambda\rho_h) \right\} \quad 7-24$$

$$L = \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_e(R)] \text{Laguerre}L^2[a'_{01e}, 0, \xi'_e(R)]}{\text{Exp}[-\xi_e(R)] \text{Hypergeometric}U^2[-a_{01e}, 1, \xi_e(R)]} \right\} \\ \left\{ \int_R^{\infty} \rho_e d\rho_e \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01e}, 1, \xi_e) \text{Exp}[-\xi_e] K_o(2\lambda\rho_e) \right. \\ \left. \int_0^{\rho_e} \rho_h d\rho_h \text{Laguerre}L^2(a'_{01h}, 0, \xi'_h) \text{Exp}[-\xi'_h] I_o(2\lambda\rho_h) \right\} \quad 7-25$$

$$M = \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_h(R)] \text{Laguerre}L^2[a'_{01h}, 0, \xi'_h(R)]}{\text{Exp}[-\xi_h(R)] \text{Hypergeometric}U^2[-a_{01h}, 1, \xi_h(R)]} \right\} \\ \left\{ \int_0^R \rho_e d\rho_e \text{Laguerre}L^2(a'_{01e}, 0, \xi'_e) \text{Exp}[-\xi'_e] I_o(2\lambda\rho_e) \right. \\ \left. \int_R^{\infty} \rho_h d\rho_h \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01h}, 1, \xi_h) \text{Exp}[-\xi_h] K_o(2\lambda\rho_h) \right\} \quad 7-26$$

$$\begin{aligned}
P = & \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_e(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01e}, 0, \xi'_e(R)]}{\text{Exp}[-\xi_e(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01e}, 1, \xi_e(R)]} \right\} \\
& \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_h(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01h}, 0, \xi'_h(R)]}{\text{Exp}[-\xi_h(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01h}, 1, \xi_h(R)]} \right\} \\
& \left\{ \int_R^\infty \rho_e d\rho_e \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01e}, 1, \xi_e) \text{Exp}[-\xi_e] K_o(2\lambda\rho_e) \right. \\
& \left. \int_R^{\rho_e} \rho_h d\rho_h \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01h}, 1, \xi_h) \text{Exp}[-\xi_h] I_o(2\lambda\rho_h) \right\} + \\
& \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_e(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01e}, 0, \xi'_e(R)]}{\text{Exp}[-\xi_e(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01e}, 1, \xi_e(R)]} \right\} \\
& \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_h(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01h}, 0, \xi'_h(R)]}{\text{Exp}[-\xi_h(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01h}, 1, \xi_h(R)]} \right\} \\
& \left\{ \int_R^\infty \rho_e d\rho_e \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01e}, 1, \xi_e) \text{Exp}[-\xi_e] I_o(2\lambda\rho_e) \right. \\
& \left. \int_R^{\rho_e} \rho_h d\rho_h \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01h}, 1, \xi_h) \text{Exp}[-\xi_h] K_o(2\lambda\rho_h) \right\} \quad 7-27
\end{aligned}$$

Böylece normalizasyon katsayısı ,

$$N^{-2} = -4\pi \frac{d}{d\lambda} (K + L + M + P) \quad 7-28$$

bulunur.

Eksiton için bağlanma enerjisi, sistemde etkileşmeyen bir elektron ve holün toplam E enerjisi, ve eksiton sisteminin $\langle H(R, B) \rangle$ toplam enerjisi aralarındaki fark ile verilir.

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad 7-29$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h^*} + \hbar\omega'_e \left(a'_{01(e)} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega'_h \left(a'_{01(h)} + \frac{1}{2} \right) \quad 7-30$$

Eksiton sisteminin $\langle H(R, B) \rangle$ toplam enerjisi,

$$\langle H(R, B) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad 7-31$$

dir. Burada şu noktaya dikkat edilmelidir. E ve $\langle H(R, B) \rangle$ enerjilerindeki $\langle V \rangle$ potansiyel beklenen değerleri her ikisinde aynı değildir. $\langle H(R, B) \rangle$ enerjisinde bulunan $\langle V \rangle$ potansiyeli, kuşatma potansiyeli yanında Coulomb potansiyelini de içermektedir.

Coulomb potansiyelinin beklenen değeri aşağıdaki gibi hesaplanmıştır:

$$\langle V \rangle = \left\langle -\frac{e^2}{\epsilon_o \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}} \right\rangle \quad 7-32$$

$$\langle V \rangle = \int_{\text{tümuzay}} \Psi^* V \Psi d\tau \quad 7-33$$

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex1}^* V \Psi_{ex1} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz + \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_R^{\infty} \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex2}^* V \Psi_{ex2} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz + \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_R^{\infty} \rho_e \rho_h \Psi_{ex3}^* V \Psi_{ex3} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz + \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_R^{\infty} \int_R^{\infty} \rho_e \rho_h \Psi_{ex4}^* V \Psi_{ex4} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \end{aligned} \quad 7-34$$

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & -N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^R \rho_e \rho_h \text{Exp}\left[-\frac{m_e^* \dot{\omega}_e \rho_e^2}{2\hbar}\right] \text{Exp}\left[-\frac{m_h^* \dot{\omega}_h \rho_h^2}{2\hbar}\right] \frac{e^2 \text{Laguerre}L^2\left[\frac{\epsilon_e}{\dot{\omega}_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \dot{\omega}_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]}{\epsilon_o \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}} \\ & \text{Laguerre}L^2\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\dot{\omega}_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \dot{\omega}_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-2\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + N^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \\
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^R \rho_e \rho_h (\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{2\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{2\hbar}\right]) \frac{e^2 \text{HypergeometricU}^2\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]}{\epsilon_o \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}} \\
& \text{LaguerreL}^2\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-2\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \\
& + N^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \\
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^R \rho_e \rho_h (\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{2\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{2\hbar}\right]) \frac{(-e^2) \text{LaguerreL}^2\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]}{\epsilon_o \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}} \\
& \text{HypergeometricU}^2\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-2\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \\
& + N^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \left(\frac{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{LaguerreL}\left[\frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar} - \frac{1}{2}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]}{\text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h R^2}{4\hbar}\right] \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} R^2\right]} \right)^2 \\
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^R \rho_e \rho_h (\text{Exp}\left[\frac{-m_e^* \omega_e \rho_e^2}{2\hbar}\right] \text{Exp}\left[\frac{-m_h^* \omega_h \rho_h^2}{2\hbar}\right]) \frac{(-e^2) \text{HypergeometricU}\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_e}{\omega_e \hbar}, 1, \frac{m_e^* \omega_e}{2\hbar} \rho_e^2\right]}{\epsilon_o \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}} \\
& \text{HypergeometricU}^2\left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_h}{\omega_h \hbar}, 1, \frac{m_h^* \omega_h}{2\hbar} \rho_h^2\right] \text{Exp}\left[-\lambda \sqrt{(\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h)^2 + z^2}\right] d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz
\end{aligned}$$

7-35

Denklem 7-35 de gerekli düzenlemeler yapılırsa K, L, M, P integralleri cinsinden yazılabilir. Böylece Coulomb potansiyelinin beklenen değeri aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\langle V \rangle = \frac{2e^2}{\epsilon_0} N^2 4\pi^2 (K + L + M + P) \quad 7-36$$

N normalizasyon sabiti yerine yazılırsa potansiyelin beklenen değeri,

$$\langle V \rangle = \frac{2e^2}{\epsilon_0} \frac{(K + L + M + P)}{\frac{d}{d\lambda}(K + L + M + P)} \quad 7-37$$

bulunur.

Eksiton sisteminin ortalama kinetik enerjisi $\langle T \rangle$, elektron ve holün kinetik enerjileri toplamıdır. Kütle merkezinin kinetik enerjisi ise ihmal edilmiştir.

$$\langle T \rangle = \langle T_e \rangle + \langle T_h \rangle \quad 7-38$$

Elektron için kinetik enerjinin $\langle T_e \rangle$ beklenen değeri bilinirse, hol için de aynı yazılabileceğinden (yalnızca bu kez hole ait sabitler kullanılır), $\langle T \rangle$ toplamı hesaplanabilir.

$$\langle T \rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} + \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_h^2} + \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} + \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \right) \right\rangle \quad 7-39$$

$$\langle T_e \rangle = \int_{\text{tümuzay}} \Psi_{ex}^* T \Psi_{ex} d\tau \quad 7-40$$

$$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi R} \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex1}^* T \Psi_{ex1} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz +$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi \infty} \int_0^R \rho_e \rho_h \Psi_{ex2}^* T \Psi_{ex2} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz +$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi R} \int_0^{\infty} \rho_e \rho_h \Psi_{ex3}^* T \Psi_{ex3} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz +$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi R} \int_0^{\infty} \rho_e \rho_h \Psi_{ex4}^* T \Psi_{ex4} d\rho_e d\rho_h d\phi_e d\phi_h dz \quad 7-41$$

Ortalama potansiyel hesabına benzer şekilde dalga fonksiyonları yerine yazılarak gerekli düzenlemeler yapılırsa $\langle T \rangle$ aşağıdaki gibi bulunur:

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h^*} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_h^*} + \hbar \omega'_e \left(a'_{01(e)} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega'_h \left(a'_{01(h)} + \frac{1}{2} \right) \quad 7-42$$

Eksiton sisteminin toplam enerjisi,

$$\langle H(R, B) \rangle = \left\{ \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h^*} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_h^*} + \right.$$

$$\left. \hbar \omega'_e \left(a'_{01(e)} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega'_h \left(a'_{01(h)} + \frac{1}{2} \right) + \frac{2e^2}{\varepsilon_o} \frac{(K + L + M + P)}{\frac{d}{d\lambda}(K + L + M + P)} \right\} \quad 7-43$$

biçiminde yazılabilir.

Buna göre $E_b(R, B)$ bağlanma enerjisi,

$$E_b(R, B) = E - \langle H(R, B) \rangle \quad 7-44$$

$$E_b(R, B) = -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\mu^*} - \frac{2e^2}{\varepsilon_o} \frac{(K + L + M + P)}{\frac{d}{d\lambda}(K + L + M + P)} \quad 7-45$$

bulunur.

Burada μ eksitonun indirgenmiş kütesidir ve aşağıdaki gibi verilir.

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad 7-46$$

$E_b(R, B)$ bağlanma enerjisi Rydberg sabiti cinsinden,

$$E_b(R, B) = -(\lambda a_B)^2 - 4a_B \frac{(KK + LL + MM + PP)}{\frac{d}{d\lambda}(KK + LL + MM + PP)} \quad 7-47$$

yazılabilir.

Burada KK, MM, LL, PP integralleri, K, L, M, P integrallerinde $\rho_{e(h)} = Rt_{e(h)}$ dönüşümü yapılarak elde edilen integrallerdir ve aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned} KK = & \left\{ \int_0^1 R^4 t_e dt_e \text{Laguerre}L^2(a'_{01e}, 0, t_e^2 \xi'_e(R)) \text{Exp}[-t_e^2 \xi'_e(R)] K_o(2\lambda R t_e) \right. \\ & \int_0^{t_e} t_h dt_h \text{Laguerre}L^2(a'_{01h}, 0, t_h^2 \xi'_h(R)) \text{Exp}[-t_h^2 \xi'_h(R)] I_o(2\lambda R t_h) + \\ & \int_0^1 R^4 t_e dt_e \text{Laguerre}L^2(a'_{01e}, 0, t_e^2 \xi'_e(R)) \text{Exp}[-t_e^2 \xi'_e(R)] I_o(2\lambda R t_e) \\ & \left. \int_{t_e}^1 t_h dt_h \text{Laguerre}L^2(a'_{01h}, 0, t_h^2 \xi'_h(R)) \text{Exp}[-t_h^2 \xi'_h(R)] K_o(2\lambda R t_h) \right\} \quad 7-48 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} LL = & \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_e(R)] \text{Laguerre}L^2[a'_{01e}, 0, \xi'_e(R)]}{\text{Exp}[-\xi_e(R)] \text{Hypergeometric}U^2[-a_{01e}, 1, \xi_e(R)]} \right\} \\ & \left\{ \int_1^\infty R^4 t_e dt_e \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01e}, 1, t_e^2 \xi_e(R)) \text{Exp}[-t_e^2 \xi_e(R)] K_o(2\lambda R t_e) \right. \\ & \left. \int_0^1 t_h dt_h \text{Laguerre}L^2(a'_{01h}, 0, t_h^2 \xi'_h(R)) \text{Exp}[-t_h^2 \xi'_h(R)] I_o(2\lambda R t_h) \right\} \quad 7-49 \end{aligned}$$

$$MM = \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_h(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01h}, 0, \xi'_h(R)]}{\text{Exp}[-\xi_h(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01h}, 1, \xi_h(R)]} \right\}$$

$$\left\{ \int_0^1 R^4 t_e dt_e \text{Laguerre}L^2(a'_{01e}, 0, t_e^2 \xi'_e(R)) \text{Exp}[-t_e^2 \xi'_e(R)] I_o(2\lambda R t_e) \right.$$

$$\left. \int_1^\infty t_h dt_h \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01h}, 1, t_h^2 \xi_h(R)) \text{Exp}[-t_h^2 \xi_h(R)] K_o(2\lambda R t_h) \right\} \quad 7-50$$

$$PP = \left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_e(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01e}, 0, \xi'_e(R)]}{\text{Exp}[-\xi_e(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01e}, 1, \xi_e(R)]} \right\}$$

$$\left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_h(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01h}, 0, \xi'_h(R)]}{\text{Exp}[-\xi_h(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01h}, 1, \xi_h(R)]} \right\}$$

$$\left\{ \int_1^\infty R^4 t_e dt_e \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01e}, 1, t_e^2 \xi_e(R)) \text{Exp}[-t_e^2 \xi_e(R)] K_o(2\lambda R t_e) \right.$$

$$\left. \int_1^{t_e} t_h dt_h \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01h}, 1, t_h^2 \xi_h(R)) \text{Exp}[-t_h^2 \xi_h(R)] I_o(2\lambda R t_h) \right\} +$$

$$\left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_e(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01e}, 0, \xi'_e(R)]}{\text{Exp}[-\xi_e(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01e}, 1, \xi_e(R)]} \right\}$$

$$\left\{ \frac{\text{Exp}[-\xi'_h(R)]\text{Laguerre}L^2[a'_{01h}, 0, \xi'_h(R)]}{\text{Exp}[-\xi_h(R)]\text{Hypergeometric}U^2[-a_{01h}, 1, \xi_h(R)]} \right\}$$

$$\left\{ \int_1^\infty R^4 t_e dt_e \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01e}, 1, t_e^2 \xi_e(R)) \text{Exp}[-t_e^2 \xi_e(R)] I_o(2\lambda R t_e) \right.$$

$$\left. \int_{t_e}^\infty t_h dt_h \text{Hypergeometric}U^2(-a_{01h}, 1, t_h^2 \xi_h(R)) \text{Exp}[-t_h^2 \xi_h(R)] K_o(2\lambda R t_h) \right\} \quad 7-51$$