

**SİLİNDİRİK KUANTUM KUYUSUNDA
DİELEKTRİK SABİTİ UYUŞMAZLIĞININ
HİDROJENİK SAFSIZLIK BAĞLANMA
ENERJİSİNE ETKİLERİ**

**KAMİL ATASEVER
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
2007**

**SİLİNDİRİK KUANTUM KUYUSUNDA DİELEKTRİK SABİTİ
UYUŞMAZLIĞININ HİDROJENİK SAFSIZLIK BAĞLANMA
ENERJİSİNE ETKİLERİ**

**KAMİL ATASEVER
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
2007**

Danışman: Y. Doç. Dr. H. Doğan KARKI

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ'NE

Bu çalışma, jürimiz tarafından, Fizik Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan :
Üye :
Üye :

ONAY

Yukarıdaki imzaları, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylıyorum.

.... / ... / 2007

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Bu tez, Cumhuriyet Üniversitesi Senatosunun 05.01.1984 tarihli toplantısında kabul edilen ve daha sonra 30.12.1993 tarihinde C.Ü.Fen Bilimleri Enstitüsü müdürlüğünce hazırlanan ve yayınlanan “Yüksek Lisans ve Doktora tez yazım kılavuzu” adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
İÇİNDEKİLER	I
ÖZET	II
SUMMARY	III
ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR	IV
ŞEKİLLER DİZİNİ	V
ÇİZELGE DİZİNİ	VI
1. GİRİŞ	1
2. MADDENİN YAPISI	2
2.1. Katıların Band Yapısı	2
3. YARIİLETKENLER	4
3.1. Yarıiletkenlerin Band Yapısı	5
3.2. Yarıiletkenlerde Dolaylı ve Dolaysız Band Geçişleri	6
4. HETEROYAPI	8
5. DİELEKTRİK	11
6. ETKİN KÜTLE	12
7. SİLİNDİRİK KUANTUM TELİ	14
8. KUYU PROFİLİNE GÖRE DİELEKTRİK SABİTİNE BAĞLI TABAN DURUMU BAĞLANMA ENERJİSİ HESABI	16
8.1. Sonsuz Kuyu Durumu için;	16
8.2. Sonlu Kuyu Durumu için;	21
9. DİELEKTRİK SABİTİNE BAĞLI TABAN DURUMU BAĞLANMA ENERJİSİ	27
9.1. Sonsuz Kuyu Durumu için;	28
9.2. Sonlu Kuyu Durumu için;	29
10. SONUÇ	41
11. KAYNAKLAR	43
12. ÖZGEÇMİŞ	45
13. EKLER	46
Ek-1	
Ek-2	
Ek-3	

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

**SİLİNDİRİK KUANTUM KUYUSUNDA DIELEKTRİK SABİTİ
UYUŞMAZLIĞININ HİDROJENİK SAFSIZLIK BAĞLANMA ENERJİSİNE
ETKİLERİ**

KAMİL ATASEVER

Cumhuriyet Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü

Danışman : Y. Doç. Dr. H. Doğan KARKI

Bu çalışmada, GaAs/Al_xGa_{1-x}As silindirik kuantum kuyusunda tel eksenine paralel uygulanan düzgün manyetik alan altındaki dielektrik sabitinin hidrojenik safsızlık bağlanma enerjisine etkisi incelenmiştir. Özellikle, Sonlu ve sonsuz potansiyel kuyuları için etkin kütle ve varyasyonel metod yaklaşımı kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır. Dielektrik sabiti ve kuyu genişliği değiştirildiği zaman, hidrojenik safsızlığın taban durumu bağlanma enerjisi değişimi çalışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: dielektrik, bağlanma enerjisi, silindirik kuyu.

SUMMARY

MSc Thesis

**THE EFFECT OVER THE BINDING ENERGY OF HYDROGEN LIKE
IMPURITY OF THE DIELECTRIC CONSTANT MISMATCH IN
CYLINDRICAL QUANTUM WELL**

Kamil ATASEVER

Cumhuriyet University
Graduate School of Natural and Applied Science
Department of Physics

Supervisor : Asist. Prof. Dr. H. Doğan KARKI

In this work, the effect on the binding energy of hydrogenic impurities of the dielectric constant mismatch in cylindrical quantum wire in the presence of a uniform external magnetic field applied parallel to the wire axes in GaAs/Al_xGa_{1-x}As has been investigated. Especially, the calculations have been performed by using the effective mass approximation and variational method for finite and infinite confinement potential. It has been studied that the variation of the binding energy of the ground state of hydrogenic impurities when the dielectric constant and the wire radius was changed.

Keywords : dielectric mismatch, binding energy, cylindrical quantum well.

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarımın her aőamasında bilgi ve deneyiminden faydalandıđım danıőmanım Sayın Y. Doç. Dr. H. Dođan Karkı'ya teőekkür ederim. Çalıőmalarım boyunca maddi ve manevi desteđini benden esirgemeyen aileme teőekkür ederim.

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil-1 :	Katıların bant yapıları	3
Şekil-2 :	Silisyum kristalinin kompleks kübik birim hücresi	4
Şekil-3 :	Yarıiletkenlerde $\varepsilon(k)$ enerjinin \vec{k} 'ya bağlı davranışı. a) Dolaysız (direct) bant geçişi, b) Dolaylı (indirect) bant geçişi göstermektedir.	5
Şekil-4 :	Γ , X ve L ile verilen süreksizliklerinin şeması: a) GaAs'da, b) AlAs'da	6
Şekil-5 :	Yarıiletkenler kullanılarak hetero yapıların elde edilmesi..	8
Şekil-6 :	GaAs/Al _x Ga _{1-x} As hetero yapısı	9
Şekil-7 :	Yarıiletkenlerin boyutlarına göre gösterimi	10
Şekil-8 :	GaAs / Al _x Ga _{1-x} As silindirik kuantum teli oluşumu	14
Şekil-9 :	Farklı dielektrik sabitli hetero yarıiletkenlerin B=500 kG manyetik alan altında taban durumu bağlanma enerjisinin (E_b / R_y) kuyu yarıçapına (R / a_b) bağlılığı	27
Şekil-10 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,4} Ga _{0,6} As dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi.	29
Şekil-11 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,4} Ga _{0,6} As 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi	30
Şekil-12 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,3} Ga _{0,7} As dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi	32
Şekil-13 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,3} Ga _{0,7} As 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi	33
Şekil-14 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,2} Ga _{0,8} As dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi	34
Şekil-15 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,2} Ga _{0,8} As 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi	35
Şekil-16 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,1} Ga _{0,9} As dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi	37
Şekil-17 :	B=200 kG manyetik alan altında, GaAs / Al _{0,1} Ga _{0,9} As 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi	38
Şekil-18 :	B=200 kG manyetik alan altında, alüminyumun x= 0,1, 0,2, 0,3 ve 0,4 GaAs / Al _x Ga _{1-x} As 'ın farklı dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi	39

ÇİZELGE DİZİNİ

Çizelge-1 : Bazı yarıiletkenlerin statik dielektrik sabitleri	26
---	----

1. GİRİŞ

Yarıiletkenlerin birleşmesiyle oluşan heteroyapılar üzerine yapılan teorik ve deneysel çalışmalar, yüksek performanslı devre elemanlarının yapılmasını sağlamıştır. Bu devre elemanlarının ışık yayması, istenilen büyüklükte potansiyel engeli oluşturulması ve az yer kaplamaları sebebiyle lazer teknolojisinde, elektronik parça kullanımı, bilgisayar, telefon vb teknolojik kullanımda hızla yerini almıştır. Heteroyapıların birleşim noktaları ve dış kaplamalarında kullanılan materyaller arasındaki dielektrik sabiti farklılığının, enerji spektrumlarına etkileri incelenmesi gereken önemli konulardan birini oluşturmuştur. Ge ve Si gibi yarıiletkenlerin yanında GaP, AlAs, GaAs, $Al_xGa_{1-x}As$, $Al_xIn_{1-x}As$, $Ga_xIn_{1-x}P$ gibi heteroyapılar da kullanılmıştır. Bu heteroyapıların büyütülmesinde metal organik kimyasal buharla büyütme (Metal Organic Chemical Vapor Deposition; MOCVD), moleküler ışın epitaksi (Molecular Beam Epitaxy; MBE), kimyasal ışın epitaksi (Chemical Beam Epitaxy; CBE) ve atomik tabaka epitaksi (Atomic Layer Epitaxy; ALE) gibi büyütme teknikleri kullanılmıştır. Büyütme tekniklerinde amaç; farklı iki veya daha fazla yarıiletken ardışık olarak bir araya getirilerek farklı potansiyel şekilleri elde etmektir. Bu yöntemlerle amaca uygun yüksek nitelikli heteroyapıların oluşturulması sağlanmıştır. Bu yapılarla elde edilen külçe yapı, kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktasıdır. Külçe yapı üç boyutlu (3D), kuantum kuyusu iki boyutlu (2D), kuantum teli bir boyutlu (1D) ve kuantum noktası sıfır boyutlu (0D)'dur. Bir ve iki boyutlu heteroyapılar olan kuantum kuyuları ve kuantum telleri çeşitli fotonik ve elektronik devrelere uygulanmıştır [1-17].

Bu çalışmada, dielektrik sabitinin bağlanma enerjisi üzerindeki etkisini incelemek için; silindirik kuantum telinde, tel eksenine paralel doğrultuda dışarıdan uygulanan homojen manyetik alan altında taban durumu bağlanma enerjisinin kuyu genişliğine ve manyetik alan şiddetine bağlı değişimleri incelenmiştir. Çünkü kuantum telinin yapı sabitleri olan kuyu genişliği ve manyetik alan şiddeti değiştirildiğinde, taban durumu bağlanma enerjisinin değişmesi beklenmektedir.

2. MADDENİN YAPISI

Külçe yapılı maddelerin bazıları, ölçülebilen boyutlara (nano) indirgenmiş olarak incelenir. Külçe yapı, düşük boyutlu yapıya (yani kristal) indirgendiğinde mekanik, optiksel, elektriksel ve manyetik özellikleri ilginç sonuçlar gözlenmektedir. Düşük boyutlu yapılardan olan kuantum kuyu boyutlarının azaltılmasıyla kuantum mekaniksel etkileri hem teorik hem de deneysel olarak araştırılmıştır. Bu çalışmaların sonuçlarından yararlanarak çeşitli fotonik ve elektronik devre elemanları yapılmıştır. Bu maddelerin yoğunluk, mekanik yapıda esneklik modülü, direnci, elektriksel ve manyetik alan altında manyetik özellikleri düşük boyut ve büyüklüklerde değişme göstermektedir. Bu katıların çoğu, IV grup elementleri, III-V veya II-VI hetero yapılardan meydana gelmektedir. Madde içinde bulunan elektronlar yasak enerji bölgelerinde bulunmaz ve sadece belirli enerji düzeylerinde bulunabilirler.

Bu çalışmada, hetero yapıdaki bir yarıiletken maddenin dışardan uygulanan manyetik alan altında taban durumu bağlanma enerjisinin dielektrik sabitine bağlı nasıl davrandığına bakacağız. Elektronun bulunamadığı bant aralıkları denilen yasak bölgeler, iletkenlik elektron dalgalarının kristal iyonları ile etkileşimi sonucu oluşur. Enerji band yapısına göre; metal, yarıiletken ve yalıtkan olarak üç guruba ayrılan katılar, aşağıda detaylı bir şekilde açıklanacaktır. Katılardaki band yapılarının çeşitliliği, elektrik iletiminde belirleyici özellik gösterir.

2.1. KATILARIN BAND YAPISI

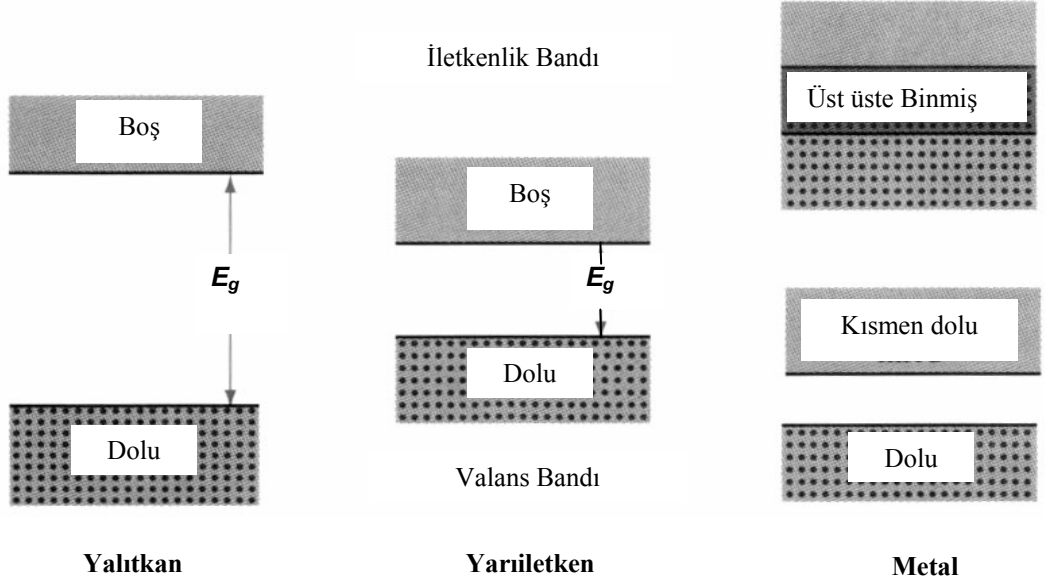
Katılarda elektronların sahip oldukları enerjiler, bandlarına göre üç yapıya ayrılır. Şekil-1'deki gibi her bir band çok sayıda ayrık ve birbirine yakın enerji seviyelerinden oluşur.

Valans bandı, atomlardaki dış kabuk elektronlarının bulunduğu banttır. Katılarda valans bandının yukarısında ve bazen de valans bantla kısmen örtüşen boş bir bant daha vardır. Bu elektronların geldiklerinde yerleşebilecekleri enerji düzeyleri olan boş banda iletim bandı denir. Valans bandı ile iletim bandı arasında bir ara bölge vardır, bu bölgeye yasak enerji aralığı denir ve E_g ile gösterilir.

Valans ile iletim bantları iç içe geçmiş ise bu tür maddelere metal denir. Demir, bakır, gümüş gibi maddeler örnek verilebilir. Metal atomlarının her birinden bir elektron serbest bulunduğundan dolayı hepsi de iletme katkıda bulunur.

Yarıiletken madde, valans bandı ile iletim bantlarını ayıran yasak bölge $E_g < 5$ eV olan maddelerdir. Örneğin oda sıcaklığında Germanyum 0.66 eV Silisyum 1,11 eV, GaAs 1,42 eV ve GaN 3,4 eV yasak enerji bant aralığına sahip yarıiletkenlerdir. Valans bandındaki elektronun, ışık, elektrik alanı gibi etki ile enerjisi artırılırsa, valans bandından elektron iletim bandına geçer.

Yalıtkan maddelerde ise; yasak enerji bant aralığı 5 eV'dan büyüktür. Örneğin kâğıt, mika, cam, SiO₂ elmas gibi maddelerdir. SiO₂ ve elmas iyi bir yalıtkan olup, bir elektronun valans



Şekil-1: Katıların bant yapıları.

bandından iletim bandına geçebilmesi için sırasıyla yaklaşık olarak 9 ve 6 eV enerjiye sahip olması gerekir [18].

Fizikte pozitif atom çekirdeğini çevreleyen elektronların davranışları elektronun toplam enerjisi ile tanımlanır. Bu enerji kinetik ve potansiyel enerjilerin toplamıdır. Bir elektronu çekirdekte uzaklaştırmak için elektrona enerji verilmesi gerekir. Bu yüzden atomdaki her bir elektronun enerjisi negatiftir. Çekirdeğe yakın yörüngeler daha büyük negatif değerli enerjiye karşı gelirler. Kuantum teorisine göre atomda, elektronların enerjisi kesikli yapıda ve belirli enerji düzeylerinde bulunur. Bu nedenle elektron bir seviyeden başka bir seviyeye geçerken enerji salar veya soğurur. Mutlak sıfır sıcaklığında normal bir atom elektronları, en düşük enerji seviyesinde olacak şekilde yerleşirler.

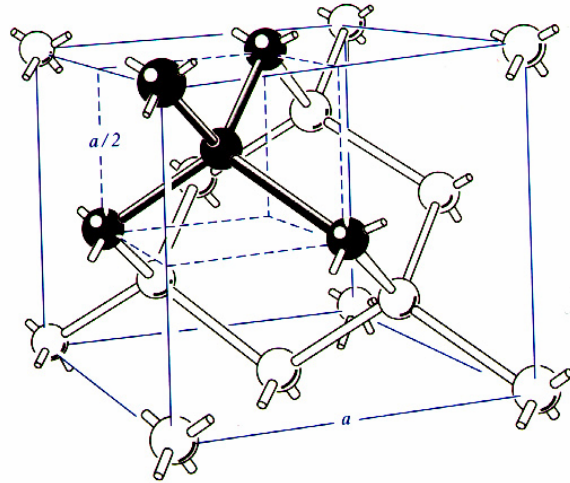
3. YARIİLETKENLER

Yarıiletken malzemelerin iletkenlikleri, iletken madde ile yalıtkan madde arasında olup $10^{-4} - 10^4 \frac{1}{\Omega m}$ arasındadır. Yarıiletkenler periyodik cetvelin IV grubunda bulunur. Bu yarıiletkenler elmas gibi kompleks kübik yapıya sahiptirler. Kovalent bağ yapan ve dört bağa sahip olan bir atomun bağ doğrultuları şekil-2’de koyu renkle gösterilmiştir.

Bu yapı merkezinde bulunan bir atomun kovalent bağlı dört komşusu karşılıklı köşelerde bulunur. Bu dört bağ arasındaki açılar eşittir, kübik birim hücre içinde bu yapıdan dört adet vardır. Bunlar şekil-2’de görüldüğü gibi ikisi tabanda bir köşegen doğrultusunda, diğer ikisi üstte olup alttakine göre 90° dönük köşegen doğrultusunda yerleşmiştir. Birim hücreye dıştan bakıldığı zaman yüzey merkezli kübik yapı görünümündedir. Buna göre birim hücre köşelerinde ve yüzey merkezlerinde toplam dört atom vardır.

Periyodik cetvelde bileşik yapan yarıiletkenler III. grup ve V. grup elemanları ile II. grup ve VI. grup elemanları arasında oluşturulan kovalent bağlı bileşikler de aynı elektron yapısına ve aynı kristal yapısına sahiptirler.

Yarıiletkenler içsel (intrinsic) yarıiletkenler ve katkı yarıiletkenler olmak üzere iki türdür. İçsel yarıiletkenliğe sahip malzemenin yapısına uygun bir katkı maddesi yerleştirilirse iletkenlik karakteristikleri değişir.

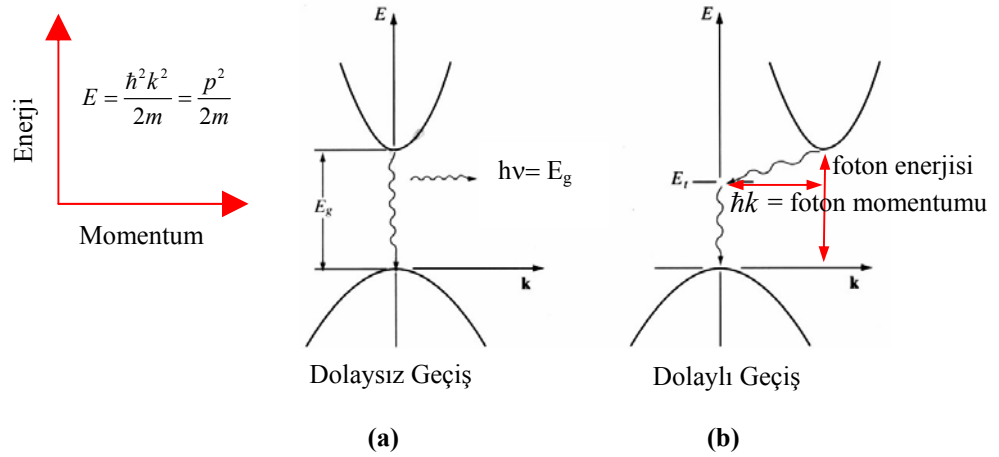


Şekil-2: Silisyum kristalinin kompleks kübik birim hücresi.

Katkılı yarıiletkenler n-tipi ve p-tipi olmak üzere iki gruba ayrılır. n-tipi katkı yarıiletkende yük taşıyıcısı elektron, p-tipi katkı yarıiletkende da ise elektron boşluğu (hole) taşıyıcısı olarak bulunur [19].

3.1. YARIİLETKENLERİN BANT YAPISI

Yarı iletkenlerin elektriksel, optiksel ve diğer özellikleri, $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ momentumuna sahip bir elektronun \vec{k} uzayında elektronun enerjisini nasıl kaybettiğine bağlıdır. Burada \hbar Planck sabiti ve $|\vec{k}|$ dalga vektörünün büyüklüğüdür. Kübik yapıya sahip olan III-V ve II-VI yarıiletken bileşikler kristal yapısını düşünelim. Brillouin bölgesinde bulunan ters örgü uzayında, elektronun hareketi k_x , k_y ve k_z ters örgü vektörünün bileşenleriyle tanımlanır. Yarıiletkenlerin bant yapısı parabolik olup, $\varepsilon(k)$ enerjinin \vec{k} 'ya bağlı davranışı şekil-3a'da gösterilmiştir. Burada valans bandının maksimumuna ve iletim bandının minimumuna yakın durumlarda elektronlar bulunur. Enerjinin bir maksimumuna



Şekil-3: Yarıiletkenlerde $\varepsilon(k)$ enerjinin \vec{k} 'ya bağlı davranışı. **a)** Dolaysız (direct) bant geçişi, **b)** Dolaylı (indirect) bant geçişi.

veya minimumuna yakın durumlar ile ilgilendiğimiz için dağılım eğrisi, $\varepsilon(k)$ parabolik olarak alınır. İletim ve valans bantlarının enerjilerini sırasıyla yazabiliriz.

$$\varepsilon_i(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

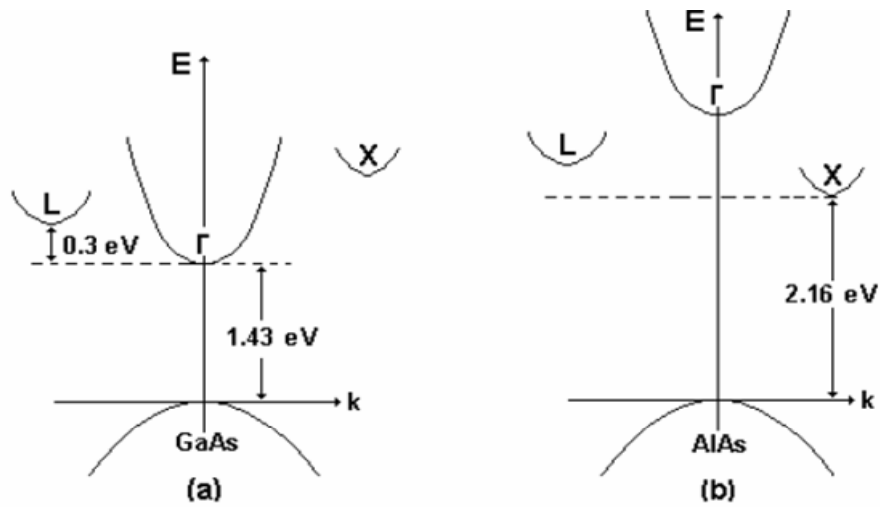
$$\varepsilon_v(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$

(1)

Burada E_g yasak enerji aralığı, \hbar Planck sabiti, \vec{k} dalga vektörünün büyüklüğü, m_e elektron ve m_h 'de boşluğun durgun kütlesidir. Valans bandının maksimumu potansiyel enerjinin sıfırı olarak alınır. İletim bandının minimumuna yakın elektronlar pozitif m_e kütleli serbest parçacıklar gibi davranırlar. Bununla birlikte valans bandında daha aşağı durumlardaki elektronların pozitif etkin kütlelere sahip olmalarına karşın, valans bandının maksimumuna yakın durumda olanlar, negatif bir etkin $-m_h$ kütlelerine sahip gözüktürler. İlk bakışta yaklaşık dolu olan valans bandının özelliklerini hesaplamak çok zor bir problem olarak görülebilir. Ancak dolu bir valans bandının davranışı dolu durumları tamamen ihmal ederek ve her bir boş durumu pozitif yüklü, pozitif kütleli m_h ve $\varepsilon_v(k)$ enerjili bir parçacık ile işgal edilmiş olduğu göz önüne alınarak hesaplanabilir.

3.2. YARIİLETKENLERDE DOLAYLI VE DOLAYSIZ BANT GEÇİŞLERİ

Yarıiletkenlerde bant yapısı, $\varepsilon(k)$ enerjisi \vec{k} 'ya bağlı davranışı şekil-3'de gösterilmiştir. Üç boyutlu Brillouin bölgesi kristal yapıya karşılık gelir. Bu bant yapısının özelliklerini ortaya koyacak şekilde yüksek simetri noktaları Γ , X ve L harfleri ile tanımlanırlar. Brillouin bölgesi ve sınırlarında bulunan bu noktalar Miller indislerini ifade edecek biçimde yüksek simetri doğrultuları boyuncadır. Yarı iletkenlerde bant geçişleri Γ , X ve L noktalarında bulunur. GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb ve tüm II-VI bileşikleri dolaysız bant geçişine sahip olup Şekil-4a'da genel gösterimi verilmiştir. Bu tür bileşiklerde bantlar,



Şekil-4: Γ , X ve L ile verilen süreksizliklerinin şeması: a) GaAs'da, b) AlAs'da.

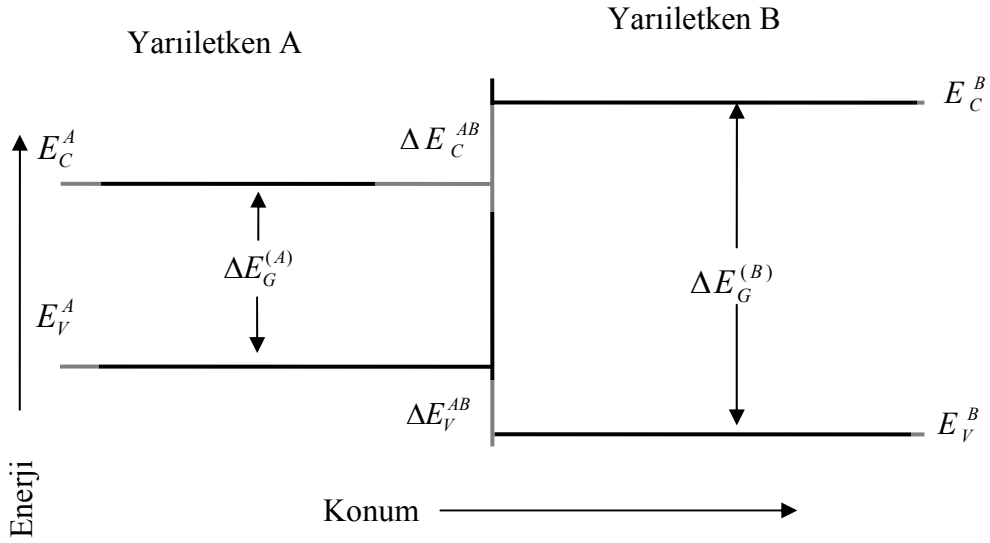
valans bandının maksimumu ve iletkenlik bandının minimumu Brillouin bölgesinin merkez noktası Γ 'da olup ara bölgede (veya yasak band enerji aralığı) ara bantlar görünmez. Bantlar arası geçişte, soğurulan veya salınan fotonun momentumu normal de ihmal edilecek kadar küçüktür. Elektron en az enerjili elektromanyetik ışınım yaparak iletim bandı Γ noktasından valans bandı Γ noktasına dalga vektörü \vec{k} 'da değişme olmaksızın (veya momentumunda değişme olmaksızın) geçer. Diğer bir deyişle, dolaysız band geçişi; Brillouin bölgesinde sadece aynı dalga vektörüne sahip bantlar arasındadır.

Si, Ge, AlAs, GaP ve AlSb gibi yarıiletkenler dolaylı band geçişine sahip maddelerdir. \vec{k} uzayında, bu maddelerin valans bandının maksimumu Brillouin bölgesinin merkezinde, fakat iletim bantlarının minimumu Γ noktasından farklı bir konumdadır. Örneğin; AlAs iletim bandı minimumu şekil-4b'de gösterildiği gibi hexagonal biçimli Brillouin bölgesi yüzeyinin ortasında bulunan X noktasındadır. Elektronunun bantlar arası geçişi iletim bandının L ve X noktaları ile valans bandının Γ noktası arasında olacaktır. Bundan dolayı, elektron en az enerjili elektromanyetik ışınım yaparak iletim bandından valans bandına \vec{k} değerinde değişme olmaksızın geçemez. Bu \vec{k} değerinde değişme ise, elektronların örgü titreşimleri veya fononlardan enerji alması/kaybetmesi olarak ortaya çıkacaktır. Böyle bir geçiş için parçacıklara ihtiyaç duyulur ve bunların olasılığı çok zayıftır. Bundan dolayı, foton ışık salınım olasılığı (ışık verimi, vb) çok düşüktür. Dolaylı band geçişli maddelerde, elektron hol çifti diğer süreçlerle yeniden birleşmesi daha fazla örgü titreşimi ve ısıyı ortaya çıkaracaktır.

Sonuç olarak, bantlar arası geçişlerde hem enerji hem de momentum korunacaktır. Geçiş dolaysız band geçişiyse momentum değişmez o zaman momentumdaki değişme doğrultusu dikeydir. Momentumda değişme varsa bu durum da bantlar arası geçiş dolaysız band geçişidir [19].

4. HETERO YAPI

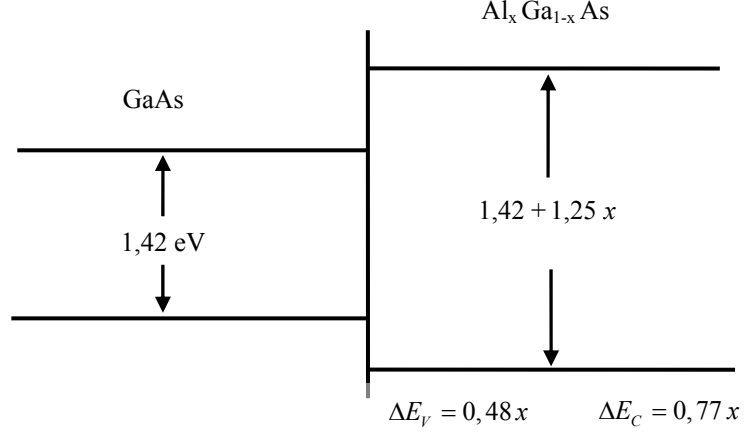
Farklı yasak bant aralığına sahip yarıiletken maddelerin üst üste birleştirilmesi ile farklı potansiyellere sahip yapılar oluşturulur. Bunlara hetero yapı denir. Hetero yapılarda kullanılan yarıiletkenlerin örgü yapıları ve örgü sabitleri arasında çok az farklılıklar bulunur. Örneğin AlAs ve GaAs hetero yapılarının örgü sabitleri arasındaki fark yaklaşık $0,01 \text{ \AA}$ 'dır. Şekil-5'de görüldüğü gibi A ve B gibi iki yarıiletken bir araya getirilmektedir. A yarıiletkeninin yasak bant aralığı B yarıiletkeninden küçüktür. Yapı üst üste oluşturulduğunda bir hetero yapı ortaya çıkar, bu hetero yapı da iki yarıiletkenin birleştiği noktada düzgün ve bir anda yükselen bir potansiyel bölgesi oluşmuştur. Yasak bant aralığının tam ortasında bulunan Fermi Enerji seviyeleri yapı da aynı seviyeye gelmiştir. İki yarıiletkenin birleşme noktalarında valans band ve iletim bantları arasında bir fark meydana



Şekil-5 : Yarıiletkenler kullanılarak hetero yapıların elde edilmesi.

gelmiştir. İletim bandında elektronlar bulunacak ve valans bandında da holler bulunacaktır. Hesaplamalarımızda kullandığımız yüksek kaliteli yarıiletkenlerden olan GaAs/Al_xGa_{1-x}As hetro yapı şekil-6'da gösterilmiştir. Burada GaAs ve AlAs örgü parametreleri sırasıyla $5,65 \text{ \AA}$ ve $5,66 \text{ \AA}$ 'dır. Öyle ki, örgü parametreleri arasındaki yüzde hata $0,18\%$ 'dir. Yarıiletken mikro yapılarda GaAs / Al_xGa_{1-x}As hetero yapısının çok kullanılmasının sebebi budur. GaAs'ın yasak bant enerji aralığı $1,42 \text{ eV}$ ve GaAs/Al_xGa_{1-x}As'ın yasak bant enerji aralığı x konsantrasyonuna bağlı olarak

değişmektedir, değeri $1,42 + 1,25x$ eV'tur. Yapının birleşmesiyle ortaya çıkan hetero yapıda iletim bantlarının oluşturduğu potansiyel fark yaklaşık yüzde altmışına yani $0,77x$ eV ve valans



Şekil 6 : GaAs/Al_xGa_{1-x}As hetero yapısı.

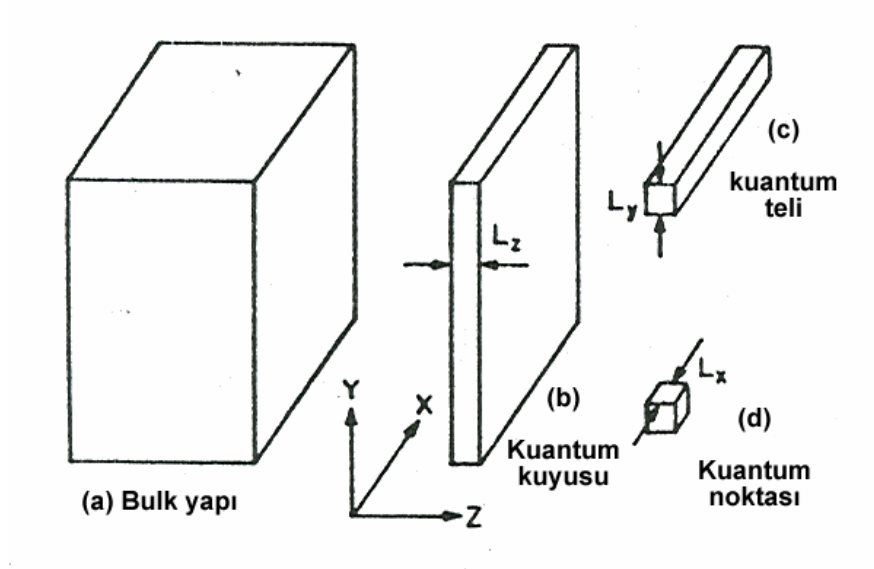
bantlarının oluşturduğu potansiyel fark yaklaşık yüzde kırkına karşılık gelir buda $0,48x$ eV'a eşittir [20].

Yarıiletkenlerin en önemli uygulamaları hetero yapıların üst üste kullanılmasıyla elde edilir. Bu yapılarla elde edilen bulk yapı, kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktası şekil-7'de gösterilmiştir. Şekillenimlerine göre yapılar, bulk yapı üç boyutlu (3D), kuantum kuyusu iki boyutlu (2D), kuantum teli bir boyutlu (1D) ve kuantum noktası sıfır boyutlu (0D)'dur. Boyuttaki azalma Coulomb etkileşme şiddetini artırmaktadır. Taban durumu bağlanma enerjisi E_b ,

$$E_b = \left(\frac{2}{D-1} \right)^2 \cdot \frac{R_y \mu}{\epsilon^2} \quad (2)$$

eşittir [21]. Burada D sistemin boyutu, R_y Ryberg sabiti olup $\frac{m_o e^4}{2\hbar^2}$ ifadesine eşit, ϵ ortamın dielektrik sabiti, μ indirgenmiş kütle, m_o elektronun durgun kütlesi ve \hbar Planck sabitidir. Denklem-2'den görüleceği gibi; 2D durumda bağlanma enerjisi 3D durumdakinin dört katı ve 1D durumda ise çok daha büyüktür. Bu da 1D sistemlerde taban durumu bağlanma enerjisi daha büyük ve Coulomb etkileşmesi çok daha kuvvetli olduğu anlamına gelmektedir. Yani, elektron ve

holden oluşan sistemin boyutunda azalma, bu parçacıkları daha küçük bir bölgede harekete zorlar ve parçacıklar zamanın büyük bir kısmını birbirine çok yakın geçirmek zorunda kalırlar. Bu nedenle, bağlanma enerjisi düşük boyutlarda daha büyük olacaktır.



Şekil-7 : Yarıiletkenlerin boyutlarına göre gösterimi.

5. DİELEKTRİK

Elektronik yapı teorisinde, elektronlar bir potansiyel içinde birbirinden bağımsız hareket eder ve iletkenlik elektronlarıyla etkileşmesinin zayıf olduğu model ile açıklanır. Fakat bilindiği üzere yükler arasındaki etkileşme Coulomb kuvvetiyle tanımlanır ve bu kuvvet güçlü ve uzun erişimlidir. Bilindiği üzere Poisson denkleminin çözümü sonucunda elde edilen potansiyel ifadesi içinde dielektrik sabiti, karmaşık bir fonksiyon ile verilir. Madde içinde pertürbasyon alanı, safsızlık yükü çevresinde oluşan bir elektrostatik alandır. Bu potansiyel alanını, en yalın biçimde merkezdeki safsızlıkla yükler arasında perdeleme etkisi yapar.

Bir metal yüksek iletkenliğe sahip olduğundan, metalin makroskobik dielektrik sabiti, dalga vektörünün sıfıra gitmesi durumunda sonsuz olma eğilimindedir. Bu sonuç Fermi-Dirac dağılımı yardımıyla elde edilen potansiyel ifade içindeki dielektrik tanımıyla uyumludur. Ancak, yarıiletken veya yalıtkanlar düşük iletkenliğe sahiptir. Çünkü taşıyıcıların ısıl uyarılmaları sonucu ilettime katkıda bulunan kısmı sıfırdır. Dielektrik sabiti uzun dalga boylarında sonlu kalacaktır. Bunun sebebi valans bandı ile iletkenlik bandı arasındaki yasak enerji aralığıdır. Ayrıca dielektrik ifadesinde dalga vektörünün sıfır olması durumunda paydadaki terim ortadan kalkacağından sonlu kalacaktır.

Yarıiletkenlerde dielektrik sabitinin hesaplanması, band yapı modelinin ayrıntılarına ihtiyaç duyar. Bu basit bir teoriyle açıklanamaz. Çünkü elektron durumları yalın düzlem dalgalar değildir. Hesaplamalara düzeltme fonksiyonun da katılmasıyla çok daha karmaşık olacak şekilde ifade edilmektedir. Biz burada bunu hesaplamayıp, sadece sonuçlarına bakacağız. Dielektrik sabiti $k=0$ 'da sabit olma eğilimindedir. Bu davranış katıların makroskobik dielektrik sabiti gözlemiyle uyuşur. Band aralığı tam sınır da her biri diğeri üzerinde dikey olarak uzanan durumlar arasındaki enerji değerinde ortalama bir mesafe gibi düşünülür.

Yarıiletkendeki safsızlık civarındaki elektrostatik alan, metaldeki gibi perdelemez. O daha basit olarak dielektrik sabitinin sabit olduğu yerde $e^2/\epsilon r$ 'yi azaltır. Bu da safsızlık civarındaki bağlı elektron durumlarının biçimlenmesine izin verir. Bu durum, safsızlık seviyelerini tartışmayı gerektirir. Elbette, ortamda bulunan artık taşıyıcı yoğunluğu varsa, Debye-Hückel formülündeki gibi, büyük mesafelerde safsızlıkların klasik perdelemesiyle karşılaşılır [22].

6. ETKİN KÜTLE

Kristal içinde elektronlar periyodik potansiyel ile etkileştiğinden tamamen serbest değildir. Bunun sonucu olarak elektronların “dalga-parçacık” hareketinin serbest uzayda elektronların hareketi ile aynı olması beklenemez. Böylece katı içinde yük taşıyıcılarına elektrodinamik denklemleri uygulama da parçacığın kütle değeri değiştirilerek kullanılır. Kristal örgü etkilerinden dolayı bunu böyle yapmak zorundayız. Bu yüzden hesaplamaların çoğunda, elektron ve elektron boşlukları hemen hemen serbest taşıyıcılar gibi davranır. Etkin kütle hesabında, çeşitli enerji bantları üzerinden ortalama alınarak, 3-boyutlu k-uzayında enerji band biçimi hesaba katılmalıdır.

Serbest elektronun momentumu

$$\vec{p} = m \vec{v} = \hbar \vec{k} \text{ 'dır.} \quad (3)$$

Burada m parçacığın kütlesi, \hbar Planck sabiti ve \vec{k} dalga vektörüdür. O zaman m kütleli serbest elektronun enerjisi

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \quad (4)$$

biçiminde yazılabilir. Denklem-4'den görüleceği gibi elektronun enerjisi \vec{k} dalga vektörünün karesiyle değiştiğinden paraboliktir. Elektronun kütlesi, enerji (ε, \vec{k}) eğrilik derecesine (ikinci türevine) ters

$$\frac{d^2 \varepsilon}{d\vec{k}^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad (5)$$

orantılı olarak bağlıdır. Katı içindeki elektronlar serbest olmamalarına rağmen enerji bantlarının çoğu valans bandının tepesinde veya iletkenlik bandının dibinde parabolik yapıya yakındır. (ε, \vec{k}) ilişkisiyle verilen bir band içinde elektronun etkin kütlesi

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 \varepsilon}{d\vec{k}^2} \right)^{-1} \quad (6)$$

eşittir [23]. Böylece bandın eğrilik derecesi elektronun etkin kütlesini belirler. Literatürde birçok örnek çizim ve hesaplamalar bulunmaktadır [24-26]. Örneğin, GaAs içinde iletkenlik bandının

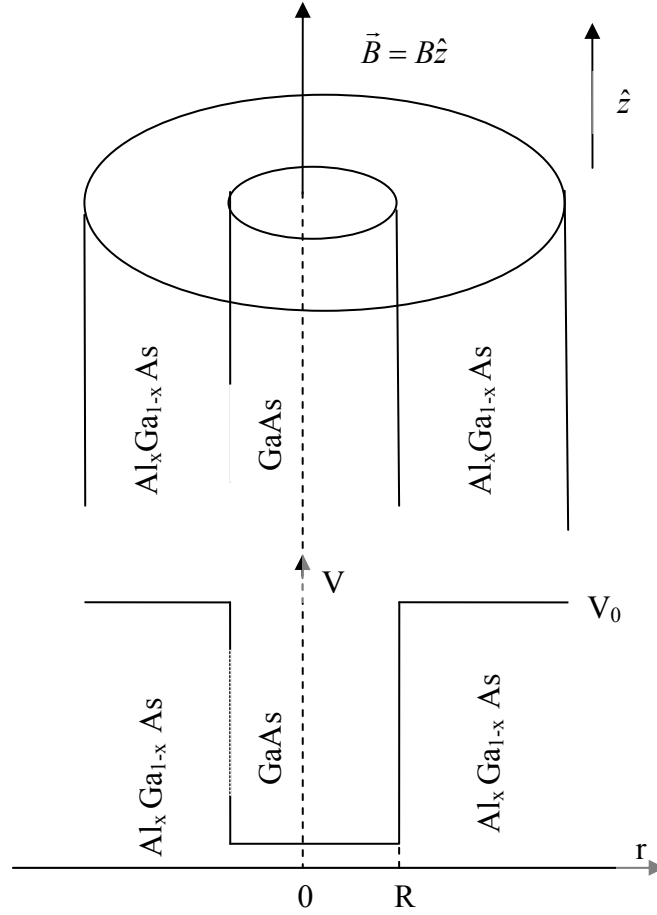
Γ 'sında bulunan bir elektronun etkin kütlesi (daha keskin eğrilik derecesi) benzer biçimde iletkenlik bandının L veya X'inin (daha zayıf eğrilik derecesi ve denklem-4'in paydasındaki terimden dolayı daha küçük değerli) minimumlarında bulunan bir elektronun etkin külesinden daha küçüktür.

$(\frac{d^2\epsilon}{dk^2})^{-1}$ 'nin eğrilik derecesi iletkenlik bandının dibinde pozitif fakat valans bandının tepesinde negatif değer alır. Çünkü denklem-4'e göre, valans bandının tepesinde yakın yerde elektronlar negatif etkin küleyle sahiptir. Elektrik alan içinde negatif yüklü valans elektronu ve negatif yük, pozitif yük ve pozitif kütleli elektron boşlukları gibi, elektrik alanı yönünde hareket ederler.

7. SİLİNDİRİK KUANTUM TELİ

Yarıiletkenlerin en önemli uygulamalarından biri basit türdeki hetero yapıların üst üste yetiştirilmesiyle elde edilen $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ yapısıdır. Alüminyum konsantrasyonu $x \leq 0,45$ arasında alınırsa, bu yapı direkt bant geçişli bir yapıdadır.

Birçok yarıiletken malzeme kullanılarak hetero yapı oluşturulabilir. Sistemin yapısı istenildiği gibi değiştirilebilir. Şekil-8'de basit bir sistem şematığı verilmiştir.



Şekil-8: $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ silindirik kuantum teli oluşumu.

İnce $GaAs$ tabakası her iki taraftan $Al_xGa_{1-x}As$ tabakasıyla örtülür. Böylece çift tabakalı kuantum teli adı verilen bir hetero yapı oluşturulur. Oluşan kuantum teline bir serbest elektron verildiği zaman elektron $GaAs$ yapısının en düşük enerji düzeyine oturur. Böylece elektron kuyusu içerisinde bulunma olasılığının öngördüğü yerde bulunur. Şekil-8'deki gibi bir kuantum teli yapısında iç bölgede $GaAs$ ve bunu çevreleyen $Al_xGa_{1-x}As$ yapısı silindirik bir

biçimdedir. Bu tür yapılara silindirik kuantum teli denir. Yapıya belli bir doğrultuda manyetik alan uyguladığımızda örneğin z doğrultusunda elektronun kuyu içerisinde hareketi ve bağlanma enerjisi incelenecektir. Öncelikle çalışmamızda dielektrik sabitinin manyetik alan etkisi altında kuyunun büyüklüğüne göre değişimi incelenmiştir. Ayrıca kuyunun dış potansiyeli sonsuz alınarak sonsuz kuyu potansiyelinde bağlanma enerjisi kuyu genişliği değiştirilerek incelenmiştir.

8. KUYU PROFİLİNE GÖRE DİELEKTRİK SABİTİNE BAĞLI TABAN DURUMU BAĞLANMA ENERJİSİ HESABI

8.1. Sonsuz Kuyu Durumu İçin;

Kuyu eksenine paralel uygulanan manyetik alan altında sonsuz potansiyele sahip R yarıçaplı silindirik kuantum teli içindeki verici iyonu ve elektrondan oluşan sistem için Hamiltoniyen

$$H = \frac{\left[\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right]^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\varepsilon |r - r_0|} + V(\rho, \phi) \quad (7)$$

ile verilir. Burada \vec{P} elektronun momentumunu, e elektronun yükünü, m^* elektronun GaAs için etkin kütleini, $\vec{A}(r)$ manyetik alan vektör potansiyeli, ε dielektrik sabiti ve $V(\rho, \phi)$ elektronun kuşatma potansiyeli ve

$$|\vec{r} - \vec{r}_0| = \sqrt{\rho^2 - \rho_0^2 - 2\rho\rho_0 \cos(\phi - \phi_0) + z^2} \quad (8)$$

göstermektedir. Denklem-8'de \vec{r}_0 safsızlık iyonunun konumu ve katkı iyonunun, ϕ_0 'da elektronun x eksenine ile yaptığı açıdır. Sonsuz kuyu için

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \rho \leq R \\ \infty, & \rho > R \end{cases} \quad (9)$$

ile verilir. Safsızlığı atomunu tel ekseninde kabul edersek $\rho_0 = 0$ olur. Düzgün manyetik alan için

vektör potansiyeli $\vec{A}(r) = \frac{\vec{B} \times \vec{r}}{2}$ olarak alınırsa işlemler kolaylaşır. Uygulanan manyetik alanın

yönü $\vec{B} = B \hat{z}$ doğrultusundadır. Silindirik koordinatlarda manyetik alan vektör potansiyeli

$A_\rho = A_z = 0$, $A_\phi = \frac{B\rho}{2}$ dir. Elektron ile safsızlık arasında ortaya çıkan Coulomb kuvvetinde

denklem-8 ile verilen ρ, ϕ ve z bağımlılığından dolayı Hamiltoniyeni değişkenlerine ayıramayacağından, denklem analitik olarak çözülemez. Bu nedenle, Hamiltoniyenin özdeğer ve özfonksiyonlarını hesaplayabilmek için varyasyonel yaklaşım kullanılmıştır. Hamiltoniyen için önerilen dalga fonksiyonu

$$\psi(r) = \begin{cases} N e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}, & 0 \leq \rho \leq R \\ 0, & \rho > R \end{cases} \quad (10)$$

şeklinde verilir. Bu denklemde $\frac{\rho^2}{2\alpha_c^2}$, N normalizasyon sabiti, α_c ince yapı sabiti $\sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ ve λ varyasyonel parametresi ve ${}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi)$ hipergeometrik fonksiyondur [27]. Yukarıdaki dalga fonksiyonu $\psi(\rho = R) = 0$ sınır koşulları için Coulomb terimi yokken yazılan Hamiltonun taban durumu dalga fonksiyonuna varyasyonel parametresinin eklenmesiyle elde edilir. Coulomb terimi olmaksızın Hamiltoniyen ifadesi Ek-1'de çözülmüştür. Elde edilen dalga fonksiyonuna $e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}$ varyasyonel terimi eklenmiştir. Gerek ρ gerekse z arttığında Coulomb terimi azalma eğilimi göstereceğinden bu değişimi $e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}$ fonksiyonu sağlar. Denklem-10'daki N dalga fonksiyonunun normalize edilmesiyle bulunur. Yani

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(r)|^2 d\rho d\phi dz = 1 \quad (11)$$

dur. Buradan da

$$N^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz = 1 \quad (12)$$

$$4\pi N^2 \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \int_0^{\infty} e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz = 1 \quad (13)$$

$$-2\pi N^2 \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \frac{d}{d\lambda} \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz = 1 \quad (14)$$

Yukarıdaki denklemde

$$K_0(2\rho_0\lambda) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (15)$$

Küresel Bessel fonksiyonudur [27]. Denklem-14'de yerine yazarsak;

$$2\pi N^2 \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho = 1 \quad (16)$$

Buradan N'yi çekersek,

$$N^{-2} = 2\pi \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho = 1 \quad (17)$$

olur. Burada integrali

$$A = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (18)$$

ile gösterirsek, normalizasyon sabitini

$$N^{-2} = 2\pi \frac{dA}{d\lambda} \quad (19)$$

biçiminde yazabiliriz. Sonsuz kuyuda profili için Hamiltonyenin potansiyel enerjiye karşılık gelen

$-\frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + z^2}}$ teriminde dielektrik sabiti

$$\epsilon = \begin{cases} \epsilon_0, & 0 \leq \rho \leq R \\ \infty, & \rho > R \end{cases} \quad (20)$$

olarak tanımlanır. Potansiyel enerjinin beklenen değeri

$$\langle V \rangle = -N^2 e^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + z^2}} \frac{1}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}} e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + z^2}} d\rho d\phi dz \quad (21)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 \int_0^R \int_0^{\infty} \rho e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + z^2}} \frac{1}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}} e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + z^2}} d\rho dz \quad (22)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 \int_0^R e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\varepsilon\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (23)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 \int_0^R e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (24)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 A \quad (25)$$

$$A = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (26)$$

elde edilir. Benzer biçimde ek-2'de verilen kinetik enerjinin beklenen değeri

$$\langle T \rangle = \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (27)$$

olarak elde edilir. Sistemin taban durumu enerjisi; kinetik ve potansiyel enerji beklenen değerlerinin

$$\langle H(R, B) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (28)$$

toplamı olarak yazılır. Buradan taban durumu bağlanma enerjisini

$$\langle H(R, B) \rangle = \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - 4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon} A \quad (29)$$

$$E = E_B + \langle H(R, B) \rangle \quad (30)$$

hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisi $E_B(R, B)$ Coulomb etkileşme terimi olmaksızın elde edilen sistemin taban durumu enerjisi $E = \hbar\omega \left(a_{01} + \frac{1}{2}\right)$ değerinden Coulomb etkileşme terimi varken ki taban durum enerjisi $\langle H(R, B) \rangle$ çıkarılmasıyla elde edilir. Buna göre bağlanma enerjisi

$$E_B = E_0 - \langle H(R, B) \rangle \quad (31)$$

$$E_B = \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2}\right) - \left[\hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - 4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon} A\right] \quad (32)$$

$$E_B = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + 4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon} A \quad (33)$$

olur. Denklem-19'u denklem-33'de yerine yazıp ve sadeleştirilirse

$$E_B(R, B) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{A}{\frac{dA}{d\lambda}} \quad (34)$$

ifadesi bulunur. Denklem-34'ü boyutsuz hale getirmek için $\rho = tR$ değişken değiştirmesi yaparsak,

$$E_B(R, B) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{\int_0^1 t R^2 e^{-t^2 \xi_R} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R) K_0(2\lambda R t_0) dt}{\frac{d}{d\lambda} \left(\int_0^1 t R^2 e^{-t^2 \xi_R} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R) K_0(2\lambda R t_0) dt \right)} \quad (35)$$

olur. Denklem-35'deki

$$\int_0^1 t R^2 e^{-t^2 \xi_R} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R) K_0(2\lambda R t_0) dt \quad (36)$$

ifadesine C diyelim. Burada ξ_R sabiti $\frac{R^2}{2\alpha_c^2}$ 'ye eşittir. Denklem-35 ifadesini $R_y \frac{e^2}{2\varepsilon a_B}$ Rydberg enerjisi cinsinden verebilmek için bağıntının her iki tarafını R_y 'ye bölersek

$$E_B = -a_B^2 \lambda^2 + 4a_B \frac{C}{\frac{dC}{d\lambda}} \quad (37)$$

elde edilir. Burada a_B elektron Bohr yarıçapı olup $\frac{\varepsilon \hbar^2}{m^* e^2}$ eşittir. Denklem-37'de dielektrik sabiti değişimine bakıldığından

$$E_B(R, B) = -\left(\frac{\lambda \hbar^2}{m^* e^2}\right)^2 \varepsilon^2 + \varepsilon \frac{4 \hbar^2}{m^* e^2} \frac{C}{d\lambda} \quad (38)$$

biçiminde yazabiliriz. Böylece dielektrik sabitine bağlı taban durumu bağlanma enerjisi E_B , λ ve ε sabitlerinin fonksiyonu olarak elde edilir. Buradan varyasyon parametresine göre E_B 'nin minimum değeri istenilen taban durumu bağlanma enerjisini verir. Böylece farklı tel yarıçapı ve manyetik alana bağlı olarak dielektrik sabitinin E_B üzerindeki etkisi hesaplanabilir.

8.2. Sonlu Kuyu Durumu İçin;

Sonlu kuyu için durum sonsuz kuyuya benzer biçimde; uygulanan manyetik alan altında silindirik kuantum telinde hidrojenik safsızlık Hamiltoniyeni

$$H = \frac{\left[\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A}(r)\right]^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\varepsilon |r - r_0|} + V(\rho, \phi) \quad (39)$$

biçiminde yazılır. Denklem-39'daki elektriksel potansiyeli sonlu kuyu için

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} 0, & \rho \leq R \\ V_0, & \rho > R \end{cases} \quad (40)$$

ile tanımlanır. Sonlu kuyudaki benzer biçimde manyetik alan için vektör potansiyeli

$$\vec{A}(r) = \frac{\vec{B} \times \vec{r}}{2} \text{ olarak alınırsa işlemler kolaylaşır. Uygulanan manyetik alanın yönü } \vec{B} = B \hat{z}$$

doğrultusunda seçilirse silindirik koordinatlarda manyetik alan vektör potansiyeli $A_\rho = A_z = 0$,

$$A_\phi = \frac{B\rho}{2} \text{ olacaktır. Elektron ile safsızlık arasında Coulomb etkileşme terimini de işin içine}$$

katarsak denklem-39'u silindirik koordinat sisteminde Hamiltoniyeni değişkenlerine ayırarak çözemeyiz. Bu nedenle, Hamiltonyenin özdeğer ve özfonksiyonlarını hesaplayabilmek için varyasyonel yaklaşım kullanılır ve gerekli düzenleme yapılırsa dalga fonksiyonu

$$\psi(r) = \begin{cases} \psi_{i\zeta}(\vec{r}) = N e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}, & 0 \leq \rho \leq R \\ \psi_{d\zeta}(\vec{r}) = N \frac{{}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi)}{U(-a_{01}, 1; \xi)} e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}, & \rho > R \end{cases} \quad (41)$$

önerilir. Burada a_{01} ve a'_{01} ise öz fonksiyonlara karşılık gelen özdeğerler ve $U(-a'_{01}, 1; \xi)$ hipergeometrik fonksiyondur [27]. Denklem-41'deki dalga fonksiyonunun her biri sınır koşulları için Coulomb terimi yokken yazılan Hamiltonun taban durumu dalga fonksiyonuna varyasyonel parametresinin eklenmesiyle elde edilir. Coulomb terimi olmaksızın Hamiltoniyen ifadesinin detaylı çözümü Ek-3'de verilmiştir. Denklem-41'deki N dalga fonksiyonlarının normalize edilmesiyle bulunur. Kuyu içinde yani $\rho < R$ normalizasyonu

$$N^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz + N^2 \int_R^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a'_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a'_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz = 1 \quad (42)$$

$$4\pi N^2 \left(\int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^{\infty} e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} dz + \int_R^{\infty} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a'_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a'_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^{\infty} e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \right) = 1 \quad (43)$$

$$-2\pi N^2 \frac{d}{d\lambda} \left(\int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz + \int_R^{\infty} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a'_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a'_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \right) = 1 \quad (44)$$

Yukarıdaki denklemde ikinci integral küresel bessel fonksiyonud olup Denklem-44'de yerine yazılırsa

$$-2\pi N^2 \frac{d}{d\lambda} \left(\int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho + \int_R^{\infty} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a'_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a'_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \right) = 1 \quad (45)$$

halini alır. Buradan N çekilip düzenlenirse

$$N^{-2} = -2\pi \frac{d}{d\lambda} (K + M) \quad (46)$$

elde edilir. Burada

$$K = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (47)$$

$$M = \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} \int_R^\infty \rho e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) K(2\rho_0\lambda) d\rho$$

dur. Dielektrik sabiti sonlu kuyu içinde ve dışında farklı değerler alacağından

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_0, & 0 \leq \rho \leq R \\ \varepsilon_1, & \rho > R \end{cases} \quad (48)$$

ile tanımlanır. Potansiyelin beklenen değeri

$$\langle V \rangle = \langle V \rangle_{\rho < R} + \langle V \rangle_{\rho > R} \quad (49)$$

yazılabilir. Burada

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = -N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} \rho d\rho d\phi dz \quad (50)$$

$$\langle V \rangle_{\rho > R} = -N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_1} \int_R^\infty \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty e^{-\xi} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} U^2(-a_{01}, 1; \xi) \rho d\rho d\phi dz$$

dur. Elektron ve safsızlık iyonu aynı yerde kabul edilirse $\phi_e = \phi_h$ ve küresel bessel fonksiyonu içerecek şekilde denklem-50'yi

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_0^R e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \rho d\rho \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (51)$$

$$\langle V \rangle_{\rho > R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_1} \int_R^\infty e^{-\xi} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} U^2(-a_{01}, 1; \xi) \rho d\rho \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz$$

ve düzenlenirse

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (52)$$

$$\langle V \rangle_{\rho > R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_1} \int_R^\infty \rho e^{-\xi} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} U^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho$$

elde edilir. Denklem-47'yi denklem-52'de kullanılırsa

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} K \quad (53)$$

$$\langle V \rangle_{\rho > R} = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_1} N^2 M - 2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} M$$

dır. Bunları denklem-49'da yerine yazılırsa potansiyelin beklenen değeri

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon} [K + M] - 2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} M \quad (54)$$

olur. Denklem-46 denklem-54'de yerine yazılırsa

$$\langle V \rangle = \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K + M]}{\frac{d}{d\lambda}(K + M)} + \frac{V_0}{\frac{d}{d\lambda}(K + M)} \frac{d}{d\lambda} M \quad (55)$$

bulunur. Kinetik enerjinin beklenen değeri

$$\langle T \rangle = -2\pi N^2 \left[\hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{d}{d\lambda} K + \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{d}{d\lambda} M \right] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (56)$$

biçiminde verilir. Denklem-46'yı denklem-56 kullanılırsa

$$\langle T \rangle = [\hbar\omega_c(a_{01} + \frac{1}{2}) - V_0 \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}[K+M]} \frac{dM}{d\lambda}] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (57)$$

olur. Burada $V_0 = \hbar\omega_c[a_{01} - a'_{01}]$ eşit olarak alınmıştır. Denklem-55 ve denklem-57'yi sistemin Hamiltonyeninde yerine yazarsak

$$\langle H(R, B) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (58)$$

$$\langle H(R, B) \rangle = \hbar\omega_c(a_{01} + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K+M]}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \quad (59)$$

bulunur. Burada $E_b = E_0 - \langle H(R, B) \rangle$ olup elektronun taban durumu bağlanma enerjisi

$$E_b(R, B) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K+M]}{\frac{d}{d\lambda}[K+L]} \quad (60)$$

olarak elde edilir. Sonsuz kuyuda olduğu gibi bağlanma enerjisini boyutsuz hale getirmek için elektronun GaAs içindeki Rydberg sabite bölüp ve $\rho = tR$ dönüşümü GaAs Bohr yarıçapı cinsinden yazılırsa

$$E_b(R, B) = -(\lambda a_B)^2 - 4a_B \frac{[Q+P]}{\frac{d[Q+P]}{d\lambda}} \quad (61)$$

elde edilir. Burada Q ve P sırasıyla

$$Q = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^1 t e^{-t^2 \xi_R} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R^2) K_0(2\lambda R t) dt \quad (62)$$

$$P = \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} \int_0^\infty t e^{-t^2 \xi_R} U^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R) K_0(2\lambda R t) dt$$

integrallerine eşittir. Denklem-61 dielektrik sabitleri cinsinden yazılırsa

$$E_b(R, B) = -\left(\lambda \frac{\varepsilon \hbar^2}{m^* e^2}\right)^2 - 4 \frac{\varepsilon \hbar^2}{m^* e^2} \frac{[Q+P]}{d[Q+P]} \quad (63)$$

Çalışmamızda denklem-48'de tanıma göre ε_0 GaAs'ın dielektrik sabiti olup, değeri 12,53'e eşittir. ε_1 ise $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 'ın dielektrik sabiti olup x konsantrasyonuna bağlı olarak değişmektedir.

9. DİELEKTRİK SABİTİNE BAĞLI TABAN DURUMU BAĞLANMA ENERJİSİ

Bilimsel açıdan sıra dışı davranış göstermeleri ve teknolojiye uygulama alanı bulmalarından dolayı birçok araştırmacı düşük boyutlu hetero yapılar üzerine odaklanmıştır. Hetero yapıların geometrik şekli ve boyutu bu özelliklerinden dolayı önemlidir. Sonuç olarak, araştırmacılar hetero yapıları çalışırken; elektron gazının yeni serbestlik derecelerine yönelmişlerdir. Bu yarı iletken hetero yapıları çalışılmasında çoğu araştırmacı statik dielektrik sabitinin farklı etkilerini ya ihmal etmiş ya da dikkat almamıştır [28-31].

Bu çalışmada, statik dielektrik sabitinin dışardan uygulanan manyetik alan altında ve tel yarıçapına bağlı taban durumu bağlanma enerjisine etkilerini incelenmiştir. Çizelge-1'den görüleceği gibi yarıiletkenlerin çoğunun statik dielektrik sabiti 10'dan büyük değere sahiptir. Bundan dolayı

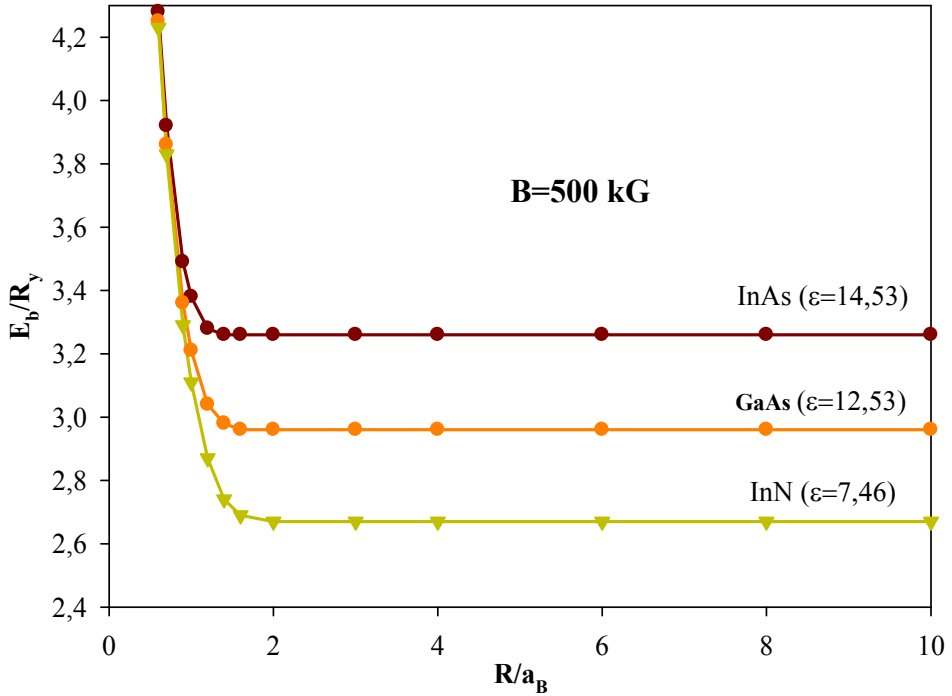
Yarıiletken Madde	Dielektrik Sabiti
InN*	7,46
A/P [†]	9,80
A/As [†]	10,06
GaN*	10,69
GaP [†]	11,10
Al _x Ga _{1-x} As	12,26 – 10,07 (x = 0,1 – 0,9)
A/Sb [†]	12,04
InP [†]	12,40
GaAs*	12,53
InAs*	14,55
GaSb [†]	15,70
InSb [†]	17,70

Çizelge-1. Bazı yarıiletkenlerin statik dielektrik sabitleri * [32] ve [†] [33-38].

hidrojenik safsızlıkla yük taşıyıcıları arasındaki Coulomb etkileşmesini azaltacağından taban durumu bağlanma enerjisi karakteristik olarak meV mertebesinde olmasına sebep olur. Çevrenin dielektrik sabiti sistemin dielektrik sabitinden küçük olduğunda etkileşme tek düze (uniform) yapımından daha büyüktür.

9.1. Sonsuz Kuyu durumu için;

Tel eksenini boyunca dışardan uygulanan 500 kG'luk manyetik alan altında farklı dielektrik sabitli yarıiletkenlerde, $\rho_0=0$ 'a yerleştirilmiş safsızlık iyonuna bağlı elektronun taban durumu bağlanma enerjisinin tel yarıçapına bağlılığı şekil-9'da gösterilmiştir. Dielektrik sabiti sırasıyla 7,46, 12,53 ve 14,53 olan InN, GaAs ve InAs, 1,00 dielektrik sabitli boşluk ile çevrilmiş olan hetero yapıli sonsuz kuyu profili çalışılmıştır. Sonsuz kuyu profilinde yukarıda belirtilen maddelerin doğrudan geçişli olduğu varsayılmış ve etkin kütle yaklaşımı kullanılarak $m^*=0,067m_0$ hesaplamalar yapılmıştır. Burada m_0 elektronun serbest kütesidir. GaAs içinde safsızlık iyonu Ryberg sabiti 5,8 meV ve Bohr yarıçapı yaklaşık olarak 98 \AA olarak alınmıştır [39]. Artan dielektrik sabitiyle elektronun taban durumu bağlanma enerjisi artmaktadır. Bunun sebebi Green et al. [40] açıkladığı üzere, kuyu genişliği azaldıkça elektronun dalga fonksiyonu kuyu tarafından sıkıştırılacaktır. Bunun sonucu dielektrik sabitinin perdeleme etkisi ortadan kalkacak ve elektron ve safsızlık iyonu birbirine çok yaklaştığı için bağlanma enerjisi de artacaktır. Kuyu genişliğinin büyük değerlerinde ise bağlanma enerjisi bulk yapı içindeki değerine eşit olacaktır. Dielektrik sabitini 7,46'dan 12,53'e çıkmasında yani % 41 değişmesi, elektron-safsızlık iyon çiftinin taban durumu bağlanma enerjisini % 10'luk değişmeye sebep olmaktadır.



Şekil-9 : Farklı dielektrik sabitli hetero yarıiletkenlerin B=500 kG manyetik alan altında taban durumu bağlanma enerjisinin (E_b/R_y) kuyu yarıçapına (R/a_B) bağlılığı.

Benzer şekilde, Dielektrik sabitini 12,53'den 14,55'e çıkmasında yani % 14 değişmesi, çiftin taban durumu bağlanma enerjisini % 9'luk değişmeye sebep olmaktadır. Hesaplanan bağlanma enerjisi değerleri literatürlerdeki değerlerle uyum halindedir [1, 41, 42].

9.2. Sonlu Kuyu durumu için;

Sonlu kuyuda dielektrik sabitinin etkilerini bulabilmek için, tel eksenini boyunca dışardan uygulanan manyetik alan altında yarıiletken bir madde farklı dielektrik sabitli yarıiletkenle (kaplamayla, çevrelemekle veya alaşım konsantrasyonu ile) birleştirilerek oluşturulan safsızlık iyonu merkezde olacak genel hetero yapı yarıiletkenlerdeki elektron taban durumu bağlanma enerjisini tel yarıçapına bağlılığını hesaplanmıştır. Sayısal hesaplamalarda; sonlu kuyu profili GaAs yarıiletken maddesi $Al_xGa_{1-x}As$ ile kaplanarak oluşturulan hetero yapı madde çalışılmıştır. Hesaplamamızda sonsuz kuyudaki gibi GaAs içinde safsızlık iyonu Ryberg sabiti 5,8 meV ve Bohr yarıçapı yaklaşık olarak 98 \AA alınmıştır [39]. Kuantum telinde meydana gelen potansiyel kuyusunun yüksekliği için $y(x) = ax + b$ biçiminde lineer denklem önerilir. Literatürdeki hesaplamaların çoğunda daha hassas hesaplayabilmek için $y(x) = ax^2 + bx + c$ kuadratik formu önerilir. Bundan dolayı hesaplamamızda $Al_xGa_{1-x}As$ içinde potansiyel kuyusu yüksekliği

$$V_0 = Q_e (1,36x + 0,22x^2) \quad (64)$$

den hesaplanmıştır [43]. Burada Q_e değeri 0,6 olup, iletkenlik bandı kesikliliğinin bir ölçüsüdür. $Al_xGa_{1-x}As$ içinde etkin kütle

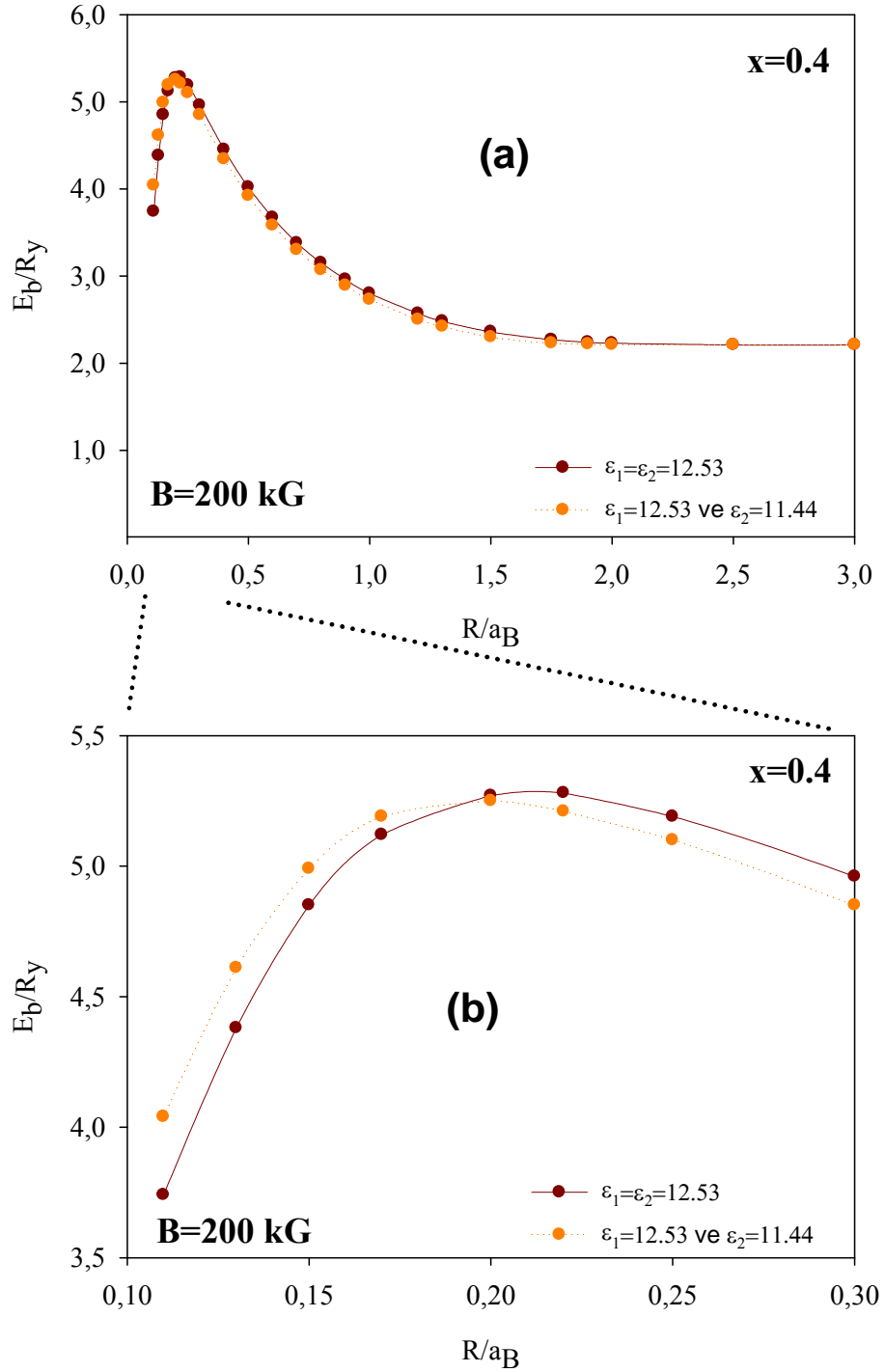
$$m^* = (0,067m_0 + 0,083)x \quad (65)$$

bağıntısından hesaplanmış ve burada m_0 daha önce belirtildiği gibi elektronun serbest kütesidir [45]. $Al_xGa_{1-x}As$ içindeki dielektrik sabiti de

$$\varepsilon = 12,53 - 2,73x \quad (66)$$

hesaplanmıştır [45]. Yukarıdaki denklem-64, denklem-65 ve denklem-66'daki x parametresi de alüminyum konsantrasyonudur. Ayrıca çalışmada, sadece dolaysız band geçişlerini dikkate alabilmek için alüminyum konsantrasyon değerini 0,45'ten küçük değerlerle sınırladık [46].

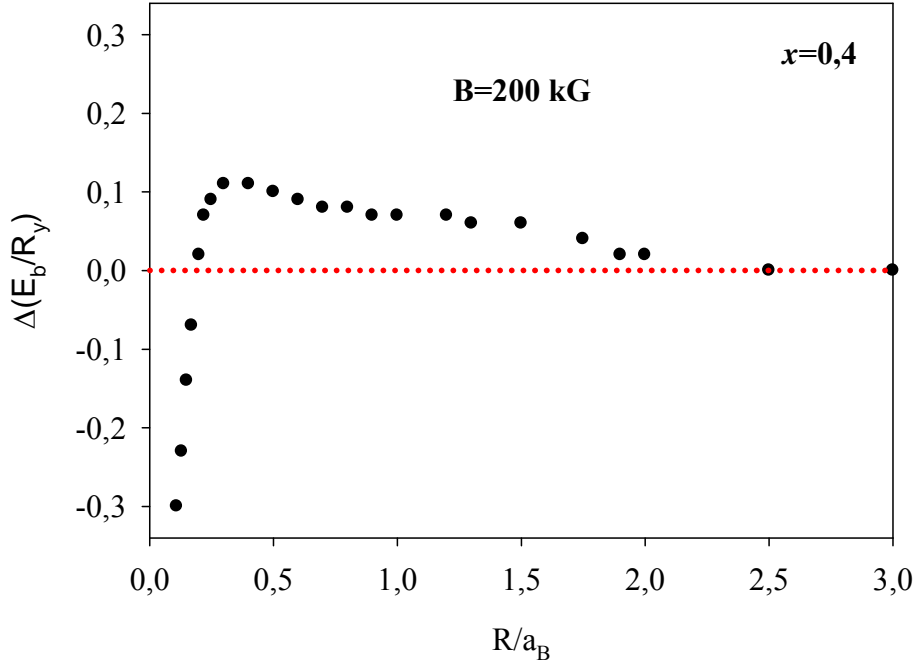
Şekil-10a ve şekil-10b'de, manyetik alan şiddetinin 200 kG ve alüminyum konsantrasyonunun 0,4 değerinde, her bir alaşım için aynı/farklı dielektrik sabit değerleri alması durumunda kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak taban durumu bağlanma enerjisi gösterilmiştir.



Şekil-10: $B=200$ kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi.

Burada $x=0,4$ değeri karşılık gelen kuyu yüksekliği yaklaşık olarak 347 meV'dur. Bu yapıda, dielektrik sabitleri sürekli çizgi hem $GaAs$ hem de $Al_xGa_{1-x}As$ için dielektrik sabit eşit (yani $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12,53$) ve noktalı çizgi ise $GaAs$ için $\epsilon_1 = 12,53$ ve $Al_xGa_{1-x}As$ için $\epsilon_2 = 11,44$ eşit olarak alınmıştır. R/a_B 'nin büyük değerlerinde bağlanma enerjisi alüminyum konsantrasyonundan tamamen bağımsız olduğundan dielektrik sabitinin etkisi yoktur. Yaklaşık olarak $R/a_B \approx 2,0$ civarında $Al_xGa_{1-x}As$ dielektrik sabiti $GaAs$ yarıiletkenin dielektrik sabitinden küçük olduğunda etkileşme tek düze (uniform) yapınınkinden daha büyüktür. Azalan R/a_B değeriyle elektron ile safsızlık iyonu birbirlerine daha çok yaklaşacağından elektronun bağlanma enerjisi daha da artacaktır. Ancak $R/a_B \approx 0,21$ değerinde bir maksimum vermekte ve burada taban durumu bağlanma enerjisinin maksimumu $\approx 30,75$ meV'a karşılık gelmektedir. R/a_B sıfır değerine yaklaşırken elektronun dalga fonksiyonundaki sızmaların artmasından dolayı bağlanma enerjisi tekrar bulk yapı içindeki değerine düşecektir.

Buradaki eğrileri karşılaştıracak olursak; dielektrik sabitinde 12,53'den 11,44'e düşmesi yaklaşık olarak % 8,7 azalmaya karşılık gelir. Bu azalmayla taban durumu bağlanma enerjisinde farklılık $R/a_B \geq 0,5$ değerlerinde % 2,2 iken R/a_B 'nin sıfır değerine yaklaşırken % 7,4



Şekil-11: B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi.

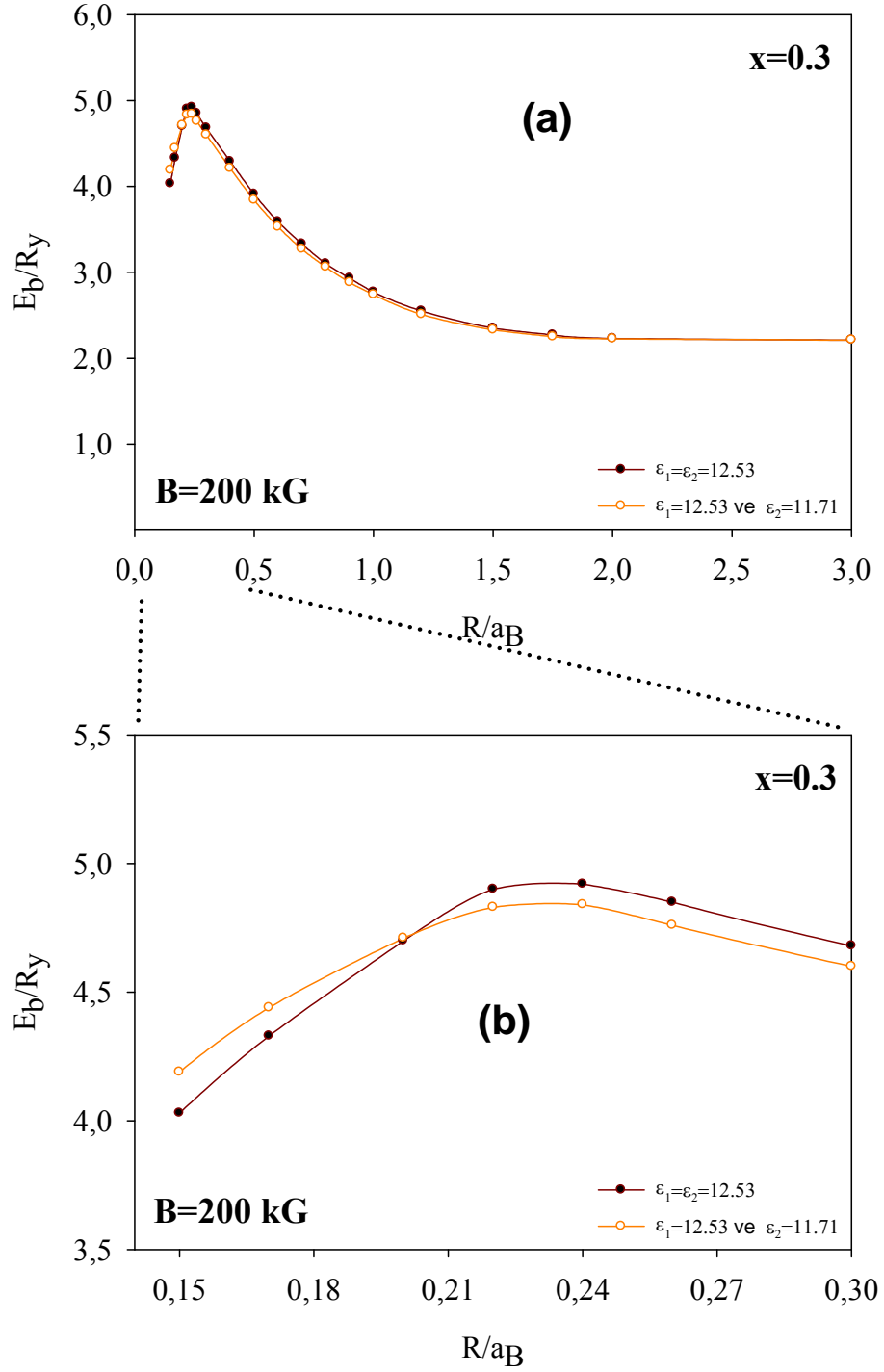
değerindedir. Ayrıca dielektrik sabitindeki bu değişim taban durumu bağlanma enerjisinde sola doğru % 4,8'lik kaymaya ve % 0,8'lik azalmaya sebep olmaktadır.

Şekil-11'de, B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ farklı/sabit dielektrik sabitlerine karşılık gelen taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi gösterilmiştir. Buradaki bağlanma enerjisinin kuyu yarıçapına bağlı davranışı şekil-10'dakine benzerdir. Taban enerjisi, R/a_B 'nin büyük değerlerinde dielektrik sabitinden bağımsız olduğu için dielektrik sabiti farklılığından bağımsızdır. Azalan R/a_B oranıyla taban durumu enerjisindeki fark artmaya başlamakta ve en büyük değişim $R/a_B \approx 0,21$ değerinde görülmüştür. $R/a_B \approx 0,19$ dielektrik sabiti işaret değiştirmekte ve de fark tekrar artmaktadır.

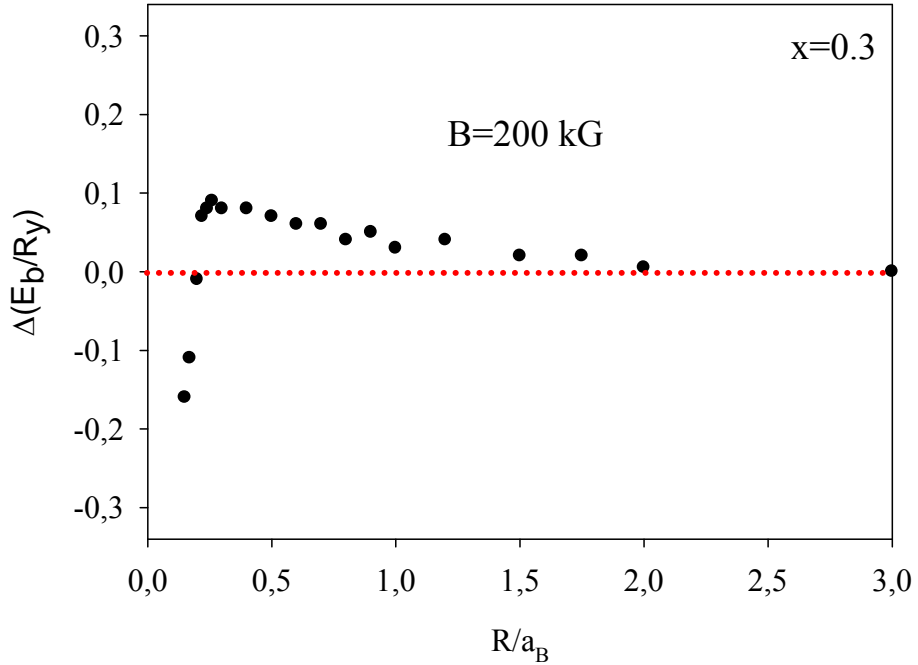
Şekil-12a ve şekil-12b'de, manyetik alan şiddetinin 200 kG ve alüminyum konsantrasyonun 0,3 değerinde, her bir alaşım için aynı/farklı dielektrik sabit değerleri olması durumunda kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak taban durumu bağlanma enerjisi gösterilmiştir. Burada $x=0,3$ değeri karşılık gelen dielektrik sabiti 11,71 ve kuyu yüksekliği 257 meV'dur. Burada sürekli çizgi dielektrik sabitlerinin eşit ve kesikli çizgi ise dielektrik sabitlerinin farklı alınması durumunda taban durumu bağlanma enerjisini göstermektedir. Taban durumu bağlanma enerjisinin davranışı alüminyum konsantrasyonun $x=0,4$ olduğu durumdakine benzer davranış göstermektedir. Yani $R/a_B \approx 2,1$ ve üzeri değerlerinde bağlanma enerjisi dielektri sabitinden tamamen bağımsızdır. Yaklaşık olarak $R/a_B < 2,1$ 'den küçük değerlerde dielektrik sabitinde farklılıktan dolayı tekrar taban durumu bağlanma enerjilerinde farklılık görülmektedir. $R/a_B \approx 0,23$ değerinde bir maksimum vermekte ve burada taban durumu bağlanma enerjisinin maksimumu $\approx 28,60$ meV'a karşılık gelmektedir.

Buradaki dielektrik sabitinin 12,53'den 11,71'e düşmesi yaklaşık olarak % 6,5 dielektrik sabitinde bir azalmaya karşılık gelir. Dielektrik sabitindeki bu azalma, $R/a_B \geq 0,24$ değerlerinde taban durumu bağlanma enerjisinde değişim % 1,6 iken R/a_B 'nin sıfır değerine yaklaşırken % 3,8 değerlerine çıkmaktadır. Ayrıca dielektrik sabitindeki bu değişim taban durumu bağlanma enerjisinde sola doğru % 0,9'luk bir kayma ve % 1,83'lük azalmaya sebep olmaktadır.

Şekil-13'de, B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ farklı/sabit dielektrik sabitlerine karşılık gelen taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi gösterilmiştir. Buradaki bağlanma enerjisinin kuyu yarıçapına bağlı davranışı yukarıdaki duruma benzerdir. Azalan R/a_B oranıyla fark artmaya başlamakta ve en büyük değişim $R/a_B \approx 0,21$ değerinde görülmüştür. Dielektrik sabiti $R/a_B \approx 0,20$ civarında işaret değiştirmekte ve de fark tekrar artmaktadır.

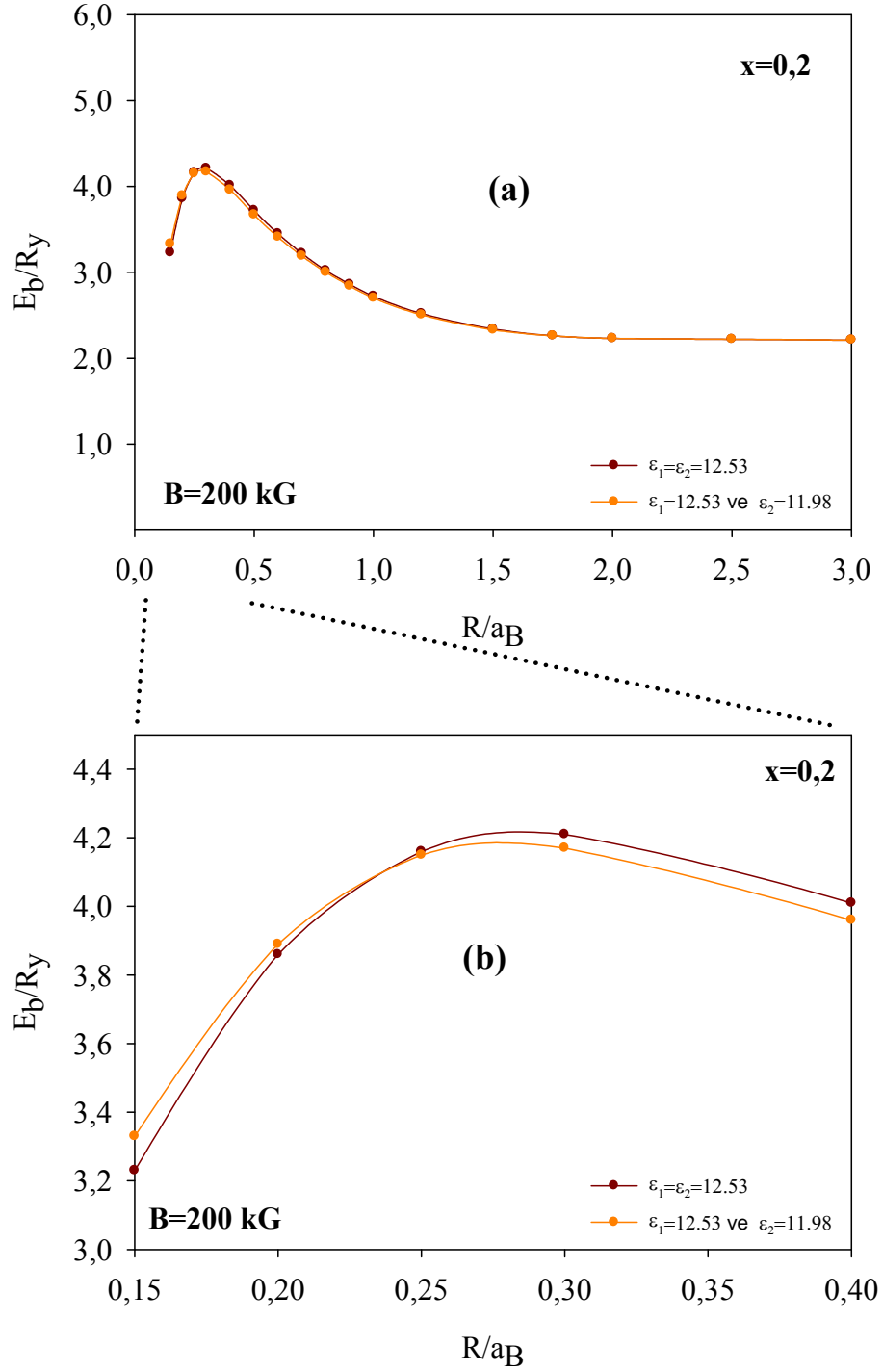


Şekil-12: $B=200$ kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi.



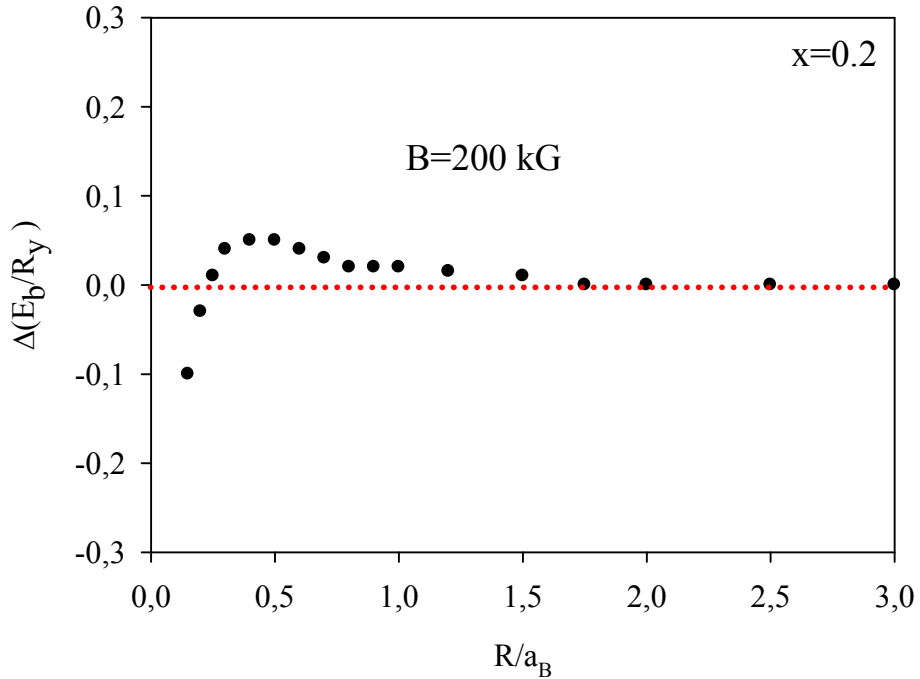
Şekil-13: $B=200$ kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi.

Şekil-14a ve şekil-14b'de, manyetik alan şiddetinin 200 kG ve alüminyum konsantrasyonunun $0,2$ değerinde, alaşımların aynı/farklı dielektrik sabit değerleri alması durumunda kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak taban durumu bağlanma enerjisi gösterilmiştir. Bu alüminyum konsantrasyonuna karşılık gelen dielektrik sabiti $11,98$ ve kuyu yüksekliği 168 meV'dur. Burada sürekli çizgi dielektrik sabitlerinin eşit ve kesikli çizgi ise dielektrik sabitlerinin farklı alınması durumunda taban durumu bağlanma enerjisini göstermektedir. Taban durumu bağlanma enerjisinin davranışı alüminyum konsantrasyonun $x=0,3$ ve $0,4$, durumdakine benzer davranış göstermektedir. $R/a_B \approx 1,6$ ve üzeri değerlerinde bağlanma enerjisi dielektrik sabitinden tamamen bağımsızdır. Yaklaşık olarak $R/a_B < 1,6$ 'dan küçük değerlerde dielektrik sabitinde farklılıktan dolayı tekrar taban durumu bağlanma enerjilerinde farklılık görünmektedir. $R/a_B \approx 0,29$ değerinde bir maksimum vermekte ve burada taban durumu bağlanma enerjisinin maksimumu $\approx 24,50$ meV'a karşılık gelmektedir.



Şekil-14: $B=200$ kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi.

Buradaki dielektrik sabitinin 12,53'den 11,98'e düşmesi yaklaşık olarak % 4,4 dielektrik sabitinde bir azalmaya karşılık gelir. Dielektrik sabitindeki bu azalma, $R/a_B > 1,75$ ve üzeri değerlerinde taban durumu bağlanma enerjisinde değişim dielektrik sabitinden bağımsızdır. $R/a_B < 1,75$ 'den küçük değerlerinde dielektrik sabitinde farklılıktan dolayı tekrar taban durumu bağlanma enerjilerinde farklılık görünmektedir. $R/a_B \approx 0,23$ değerinde bir maksimum vermekte ve burada taban durumu bağlanma enerjisinde değişim % 1,5 iken R/a_B 'nın sıfır değerine yaklaşırken % 3,3 değerlerine çıkmaktadır. Ayrıca dielektrik sabitindeki bu değişim taban durumu bağlanma enerjisinde sola doğru % 2,5'lik bir kayma ve % 0,73'lük azalmaya sebep olmaktadır.



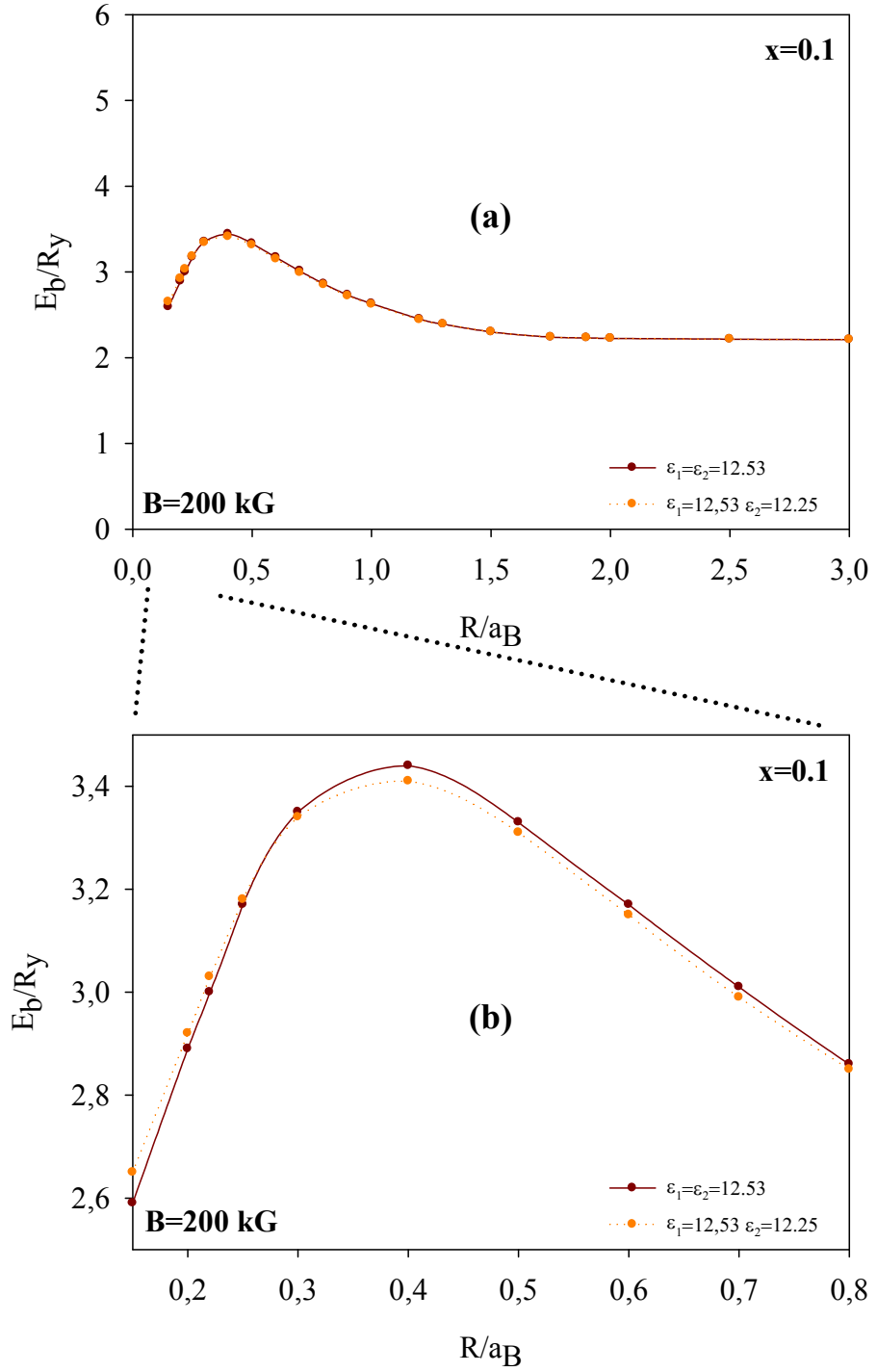
Şekil-15: B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi.

Şekil-15'de, B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ farklı/sabit dielektrik sabitlerine karşılık gelen taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi gösterilmiştir. Buradaki bağlanma enerjisinin kuyu yarıçapına bağlı davranışı yukarıdaki duruma benzerdir. Azalan R/a_B oranıyla fark artmaya başlamakta ve en büyük değişim $R/a_B \approx 0,45$

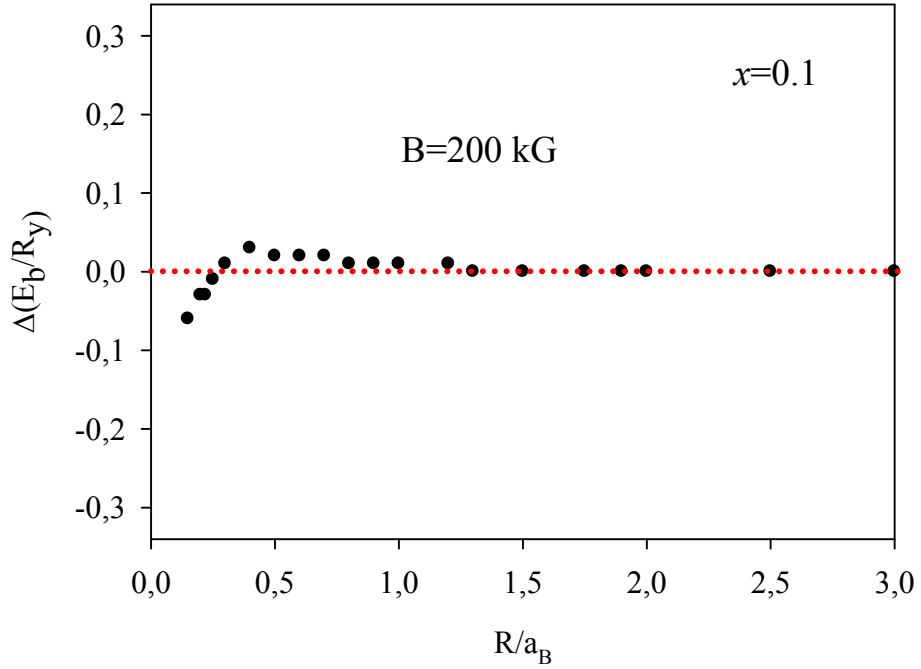
değerinde görülmüştür. Dielektrik sabiti $R/a_b \approx 0,23$ civarında işaret değiştirmekte ve de fark tekrar artmaktadır.

Şekil-16a ve şekil-16b'de, manyetik alan şiddetinin 200 kG ve alüminyum konsantrasyonun 0,1 değerinde, alaşımların aynı/farklı dielektrik sabit değerleri alması durumunda kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak taban durumu bağlanma enerjisi gösterilmiştir. Bu alüminyum konsantrasyonuna karşılık gelen dielektrik sabiti 12,25 ve kuyu yüksekliği 83 meV'dur. Burada sürekli çizgi dielektrik sabitlerinin eşit ve kesikli çizgi ise dielektrik sabitlerinin farklı alınması durumunda taban durumu bağlanma enerjisini göstermektedir. Taban durumu bağlanma enerjisinin davranışı alüminyum konsantrasyonun $x= 0,2, 0,3$ ve $0,4$, durumdakine benzer davranış göstermektedir. $R/a_b > 1,3$ ve üzeri değerlerinde taban durumu bağlanma enerjisinde değişim dielektrik sabitinden bağımsızdır. $R/a_b < 1,3$ 'den küçük değerlerinde dielektrik sabitinde farklılıktan dolayı tekrar taban durumu bağlanma enerjilerinde farklılık görünmektedir Ancak farklılık $x= 0,3$ ve $0,4$ 'daki göre o kadar küçüktür ki neredeyse R/a_b 'nin tüm değerlerinde bağlanma enerjisi dielektrik sabitinden tamamen bağımsız diyebiliriz. $R/a_b \approx 0,40$ değerinde bir maksimum vermekte ve burada taban durumu bağlanma enerjisinde değişim % 0,9 iken R/a_b 'nin sıfır değerine yaklaşırken % 2,3 değerlerine çıkmaktadır. Ayrıca dielektrik sabitindeki bu değişim taban durumu bağlanma enerjisinde sola doğru % 0,8'lik bir kayma ve % 0,9'lük azalmaya sebep olmaktadır. $R/a_b \approx 0,40$ değerinde bir maksimum vermekte ve burada taban durumu bağlanma enerjisinin maksimumu $\approx 19,95$ meV'a karşılık gelmektedir.

Şekil-17'de, B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs / Al_{0,1}Ga_{0,9}As$ farklı/sabit dielektrik sabitlerine karşılık gelen taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi gösterilmiştir. Buradaki bağlanma enerjisinin kuyu yarıçapına bağlı davranışı yukarıdaki duruma benzerdir. Azalan R/a_b oranıyla fark artmaya başlamakta ve en büyük değişim R/a_b 'ya yaklaşırken en büyük değerine ulaşmaktadır. Dielektrik sabiti $R/a_b \approx 0,28$ civarında işaret değiştirmekte ve de fark tekrar artmaktadır.

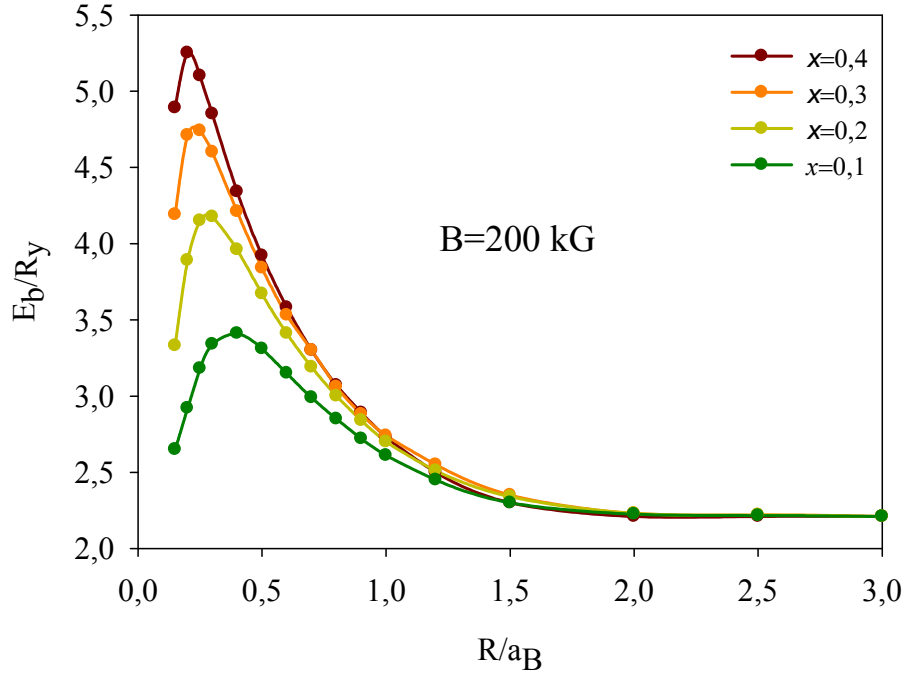


Şekil-16: $B=200$ kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ dielektrik sabitinin farklı/sabit değerinde taban durumu bağlanma enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi.



Şekil-17: B=200 kG manyetik alan altında, $GaAs/Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ 'ın farklı/sabit dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi.

Şekil-18'de, manyetik alan şiddetinin 200 kG ve alüminyum konsantrasyonunun 0,1, 0,2, 0,3 ve 0,4 değerlerinde, alaşımların farklı dielektrik sabit değerleri alması durumunda kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak taban durumu bağlanma enerjisi gösterilmiştir. Bu alüminyum konsantrasyonuna karşılık gelen dielektrik sabitleri 12,25, 11,98, 11,71 ve 11,43'dür. Taban durumu bağlanma enerjisinin genel davranışı tüm dielektrik sabitlerinde hemen hemen benzer davranış göstermektedir. $R/a_B > 2,35$ ve üzeri değerlerinde taban durumu bağlanma enerjisinde değişim dielektrik sabitlerinden bağımsızdır. $R/a_B \approx 2,35$ ve azalan değerlerinde dielektrik sabitinin taban durumu bağlanma enerjisi üzerinde etkisi ortaya çıkmaktadır. $Al_xGa_{1-x}As$ 'deki alüminyum konsantrasyonunun artmasıyla dielektrik sabiti azalmaktadır. Bu da taban durumu bağlanma enerjisinin artmasına sebep olmuştur. Kuyu genişliğinin azalmasıyla $GaAs$ bulk yapı içindeki elektron ile safsızlık iyonuna daha çok yaklaşacağından elektronun bağlanma enerjisi artmaya başlayacaktır. Kuyu genişliğinin belirli bir değerinde bir maksimum vermektedir. Kuyu



Şekil-18: B=200 kG manyetik alan altında, alüminyumun $x= 0,1, 0,2, 0,3$ ve $0,4$ $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 'in farklı dielektrik sabitinde taban durumu bağlanma enerjisi farklarının yarıçapa bağlı değişimi.

genişliğindeki daha fazla azalma elektronun dalga fonksiyonundaki sızmalara sebep olacak ve bağlanma enerjisi azalmaya başlayacaktır. Kuyu genişliği sıfır değerine yaklaşırken sızmaların daha da artmasıyla bağlanma enerjisi daha da azalacak ve taban durumu bağlanma enerjisine sahip $Al_xGa_{1-x}As$ bulk yapı içindeki değerine düşecektir. Dielektrik sabitinde azalmayla maksimum noktaları sola doğru kaymaktadır. Bu kayma miktarı artan alüminyum konsantrasyon veya azalan dielektrik sabitiyle azalmaktadır. Bu kayma miktarı dielektrik sabitlerinin 12,25 ile 11,43 arasında yaklaşık olarak % 48'dir. Bağlanma enerjisinin maksimumu % 35 artmaktadır.

10. SONUÇ

Sonlu ve sonsuz silindirik kuantum kuyusunda dielektrik sabitinin taban durumu bağlanma enerjisi üzerine nasıl bir etki oluşturduğu çalışıldı. Bunu yapabilmek için potansiyel kuyusunda tel eksenine paralel uygulanan sabit dış manyetik alan altındaki silindirik kuantum kuyusunda safsızlık için etkin kütle ve varyasyonel yaklaşım kullanılarak hamiltoniyenin çözümleri elde edildi. Bu çözümler dielektrik sabitini de içeren safsızlık iyonu ve elektron arasındaki Coulomb etkileşmesi ve tel içindeki taşıyıcıların belirli bir bölgede sınırlandırılan dalga fonksiyonunun sonucudur. Çünkü ρ ve z -yönünde elektron-safsızlık iyon çifti birbirinden uzaklaştırıldığından, bağlanma enerjisi zayıflamaktadır.

Sonsuz kuyu potansiyelinde elektron ile safsızlık iyonu arasındaki bağlanma enerjisinin farklı dielektrik sabitlerinde tel yarıçapına göre değişimi incelendi. Bunun için sonsuz kuyuda; farklı dielektrik sabitli yarıiletken yapılar seçilerek elektronun taban durumu bağlanma enerjileri hesaplandı. Kuyu içindeki elektronun artan dielektrik sabitiyle taban durumu bağlanma enerjisinin arttığı gözlenmiştir. Yarıiletken yapıların dielektrik sabitinin 10'dan küçük değerlerinde dielektrik sabitinde % 40'luk bir değişme elektronun taban durumu bağlanma enerjisinde % 10'luk artma yaparken; dielektrik sabitinin 10'dan büyük değerlerinde dielektrik sabitinde sadece % 14'lük bir değişme taban durumu bağlanma enerjisinde % 10'luk değişmeye sebep olmaktadır. Ayrıca elektronun taban durumu bağlanma enerji kuyu genişliğine bağlı davranışı literatür ile uyuşmaktadır. Potansiyel kuyu durumu için, tel yarıçapının küçük değerlerinde $R/a_B < 1$ elektronun kuyu içerisindeki kuşatmadan dolayı birbirine yaklaşan elektron-safsızlık iyon çiftinin bağlanma enerjisinin arttığı görülmüştür. Ancak bağlanma enerjisinin dielektrik sabitinden tamamen bağımsızdır. Tel yarıçapının $R/a_B > 1$ değerlerinde; elektron-safsızlık iyon çiftinin dönme yarıçapı kuyu genişliğine göre daha küçüktür. Bu yüzden kuyu ve manyetik alan kuşatma etkileri birlikte görülmekle beraber dielektrik sabitinin etkileri de ortaya çıkmakta ve azalan dielektrik sabitiyle enerjide de azalma gözlenmiştir. Kuyu yarıçapının $R/a_B > 1$ değerlerinde kuyu etkileri ortadan kalkmakta ve enerji düzeyleri seçilen yarıiletken yapı içindeki Landau düzeyleri olduğu görülmüştür [1, 40-42, 47-49].

$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ oluşan sonlu potansiyel kuyu profilindeki hetero yapıda, hem $GaAs$ hem de $Al_xGa_{1-x}As$ yarıiletkenleri için dielektrik sabiti $GaAs$ yarıiletkenin içindeki değeri olan 12,53 alınarak elektronun taban durumu bağlanma enerjisi kuyu genişliğinin fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Daha sonra da sadece dolaysız geçişe izin veren alüminyum konsantrasyonunun 0,45'den küçük değerleri için kuyu genişliğine bağlı elektronun bağlanma enerjisi üzerinde dielektrik sabitinin etkisi araştırılmıştır. Büyük kuyu yarıçaplarında Dielektrik sabitinin aynı/farklı değerlerde olmaları elektronun bağlanma enerjisi değiştirmemektedir. Ancak azalan kuyu genişliği ile dielektrik sabitinin etkisi ortaya çıkmaktadır. Azalan dielektrik sabitiyle elektron-safsızlık iyon

çiftinin bağlanma enerjisi azalırken kuyu genişliğiyle bağlanma enerjisi artmaktadır. Kuyu genişliğinin belli değerinde bağlanma enerjisi bir maksimum vermekte ve elektron dalga fonksiyonun sızmaların başlamasıyla elektron-safsızlık iyon çiftinin bağlanma enerjisi azalmaya başlamaktadır.

Sonuç olarak, çalışmış olduğumuz $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ hetero yapıda; $GaAs$ ve $Al_xGa_{1-x}As$ içinde farklı dielektrik sabiti alınması durumunda, bağlanma enerjisindeki değişme % 1'den daha azdır. Dolayısıyla hesaplamalarda bu farklılık dikkate alınmaz ise büyük hata yapılmış olmaz.

KAYNAKLAR

- [1] Spiros V. B., Gang L., ve Bajaj, K. K., Physical Review B Vol. 47, Number 3. (1993).
- [3] Lee, J., Appl. Phys., 54, 5482 (1983).
- [4] Lee, J. S pector, H. N., J. Appl. Phys., 57, 366 (1985).
- [5] Kubakaddi, S. S. and Mulimani, B. G., J. Phys., C 18, 6647 (1985).
- [6] Hassan, H. H. and Spector, J., J. Vac. Sci. Technol. A 3, 22, (1985).
- [7] Cho, H. S. and Prucnal, P. R., Phys. Rev. B 39, 11, 150 (1989).
- [8] Sercel, P. C. and Vahala, K. J., Phys. Rev. B 44, 5681 (1991).
- [9] Brum, J. A., Bastard, G., Chang, L. L. and Esaki, L. Superlatt. Microstruct. 3, 47, (1987).
- [10] Wong, K. B., Jaros, M. and Hagon, J. P., Phys. Rev. B35, 2463 (1987).
- [11] Brum, J. A. and Bastard, G., Superlatt. Microstruct. 4, 443, (1988).
- [12] Sweeny, M., Xu, J. and Shur, M. Superlatt. Microstruct. 4, 623, (1988).
- [13] Citrin, D. S. and Chang, Y. C. Phys. Rev. B 40, 11, 5507 (1989).
- [14] Sercel, P. C. and Vahala, K. J., Phys. Rev. B 42, 3690 (1990).
- [15] Baraff, G. A. and Gershoni, D., Phys. Rev. B 43, 4011 (1991).
- [16] Arakawa, Y., Yamauchi, T. and Schulman, J. N., Phys. Rev. B 43, 4732 (1991).
- [17] Bockelmann, U. and Bastard, G. Europhys. Lett. 15, 215 (1991).
- [18] Kittel, C., Intr. Solid State Phys., Wiley John & Sons, Inc., (1986).
- [19] Jaros, M., Phys. Appl. Semicond. Microstructures, Clarendon Pres, Oxford, 47 (1989).
- [20] Frensley, W. R. and Einspruch, N. G. editors, Heterostructures and Quantum Devices, A volume of VLSI Electronics: Microstructure Science. Academic Press, San Diego (1994).
- [21] Xing-Fei He, Phys. Rev. B 43, 2063, (1991).
- [22] Ziman, J. M., Principles of Theory of Solids, 2nd Ed., Cambridge University Press, 146-163, (1984), Cambridge,
- [23] Turton, R., çeviri: Yoğurtçu, Y. K., Katlıların Fiziği,, Aktif Yayınevi, 145-148, Türkiye (2005).
- [24] Wannier, G. H., Phys. Rev. 52, 191, (1937).
- [25] Slater, J. C., Phys. Rev. 76, 1592, (1949).
- [26] Luttinger, J. M. and Kohn, W., Phys. Rev. 97, 869 (1955).
- [27] Edited: Abramowitz M. and Stegun I., A., Handbook of Math. Functions., (Dover, New York), chap. 15, pp. 503-535, (1965).
- [28] Foden, C. L., Leadbeater, M. L., Burroughes, J. H. and Pepper, M., J. Phys. Cond. Math. 6 (1994) L127.
- [29] Foden, C. L., Leadbeater, M. L., and Pepper, M., J. Phys. Rev. B 52 (1995) R8646.
- [30] Jeongnim, Kim in-Wang W., and Zunger, A. Phys. Rev. B 56 (1997) R15 541.
- [31] Brown, J. W. and Spector, H. N., J. Appl. Phys. 56 (1986) 1179.

- [32] Ryczko, K., Sek G. and Misiewicz, J., Solid. State Comm. 122 (2002), 323-327.
- [33] Harrison, W. A., Electronic Structure and Properties of Solids, Freeman, (1980).
- [34] Singh, J., Physics of Semiconductors and Their Heterostructures, McGraw-Hill (1993).
- [35] Madelung, O. (Ed.), Data in Science and Technology : Semiconductors, Springer-Verlag, (1991).
- [36] Sze, S. M., Physics of Semiconductor Devices, Wiley, (1969).
- [37] Sze, S. M., Semiconductor Devices - Physics and Technology, Wiley, (1985).
- [38] Singh, j., Physics of Semiconductors and Their Heterostructures, McGraw-Hill, (1993).
- [39] Adachi, S., J. Appl. Phys. 58 (1985) R1.
- [40] Green, R. L., Bajaj, K. K. and Phelps, D. E., Phys. Rev. B 29, 1807 (1984).
- [41] Li, G. , Branis V. S. and Bajaj, K. K., J. Appl. Phys., 77, (1995), 1097-1104.
- [42] Karki, H. D., Elagoz, S., Baser, P., Amca, R. and Sokmen, I. Superlatt.& Microstruct. in press (2006) .
- [43] Bosio, C., J. Staehli, L., Guzzi, M., Burri, G., and Logan, R. A., Phys. Rev. B 38, 3263 (1988).
- [44] Casey, H. C. ve Panish, M. B., Heterostructure Lasers, Academic Press, Newyork (1978).
- [45] Landolt-Boernstein, New Series Vol. 17, Springer, Berlin (1982).
- [46] Pescetelli, S., Carlo, A. Di. and Lugli, P., Phys. Rev. B 56, R1668 (1997).
- [47] Spiros, V. B., Branis., and Bajaj, K. K., J. Appl. Phys. 77, Number 3, (1995).
- [48] Aghasyan, M. M., and Kirakosyan A. A., Physica E, 8, 281-289 (2000).
- [49] Manaselyan, A. K., and Kirakosyan A. A., Physica E, 22, 825-832 (2004).

ÖZGEÇMİŞ

1978 yılında Sivas'ta doğan Atasever, ilkokulu Vali Muammer İlköğretim okulunda ve Liseyi de Sivas Hacı Mehmet Sabancı Lisesi'nde tamamladı. 1995-1997 yıllarında Cumhuriyet Üniversitesi Meslek Yüksek Okulu Endüstriyel Elektronik Bölümünde öğrenim gördü. 1997-1998 yıllarında Cumhuriyet Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Maden Mühendisliği Bölümünde okudu. 1998 yılında Cumhuriyet Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümün kaydı yaptıran Atasever 2003 yılında Fizik Bölümünden mezun oldu. 2003-2004 öğretim yılında Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Katıhal Fizik Anabilim Dalında yüksek lisanas yapmaya hak kazandı.

Bilkent Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nün ve Tübitak'ın düzenlediği seminer ve sempozyumlara katıldı. Çeşitli özel kuruluşlarda eğitici pozisyonunda çalıştı. Özel kurumların sertifika programlarına katılarak başarı ile sonuçlandırdı.

13. EKLER

Ek 1: SİLİNDİRİK KOORDİNATLARDA ∇^2 OPERATÖRÜ

Silindirik koordinatlarda;

$$\begin{aligned}x &= \rho \cos \phi \\y &= \rho \sin \phi \\z &= z\end{aligned}\tag{1}$$

ve ifade türevlenirse

$$\begin{aligned}dx &= \cos \phi d\rho - \rho \sin \phi d\phi \\dy &= \sin \phi d\rho + \rho \cos \phi d\phi \\dz &= dz\end{aligned}\tag{2}$$

şeklindedir. Bunu matris formunda;

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\rho \sin \phi \\ \sin \phi & \rho \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\rho \\ d\phi \end{pmatrix}\tag{3}$$

şeklinde yazabiliriz. Dönüşüm matrisi;

$$M = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\rho \sin \phi \\ \sin \phi & \rho \cos \phi \end{pmatrix}\tag{4}$$

şeklinde olur. Dönüşüm matrisi M 'in tersi;

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\frac{1}{\rho} \sin \phi & \frac{1}{\rho} \cos \phi \end{pmatrix}\tag{5}$$

şeklindedir. Bu durumda;

$$\begin{pmatrix} d\rho \\ d\phi \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix}\tag{6}$$

olur.

$$\begin{pmatrix} d\rho \\ d\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\frac{1}{\rho}\sin\phi & \frac{1}{\rho}\cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} \quad (7)$$

yazılırsa buradan;

$$\begin{aligned} d\rho &= \cos\phi dx + \sin\phi dy \\ d\phi &= -\frac{1}{\rho}\sin\phi dx + \frac{1}{\rho}\cos\phi dy \end{aligned} \quad (8)$$

olarak elde edilir. Kısmi türevlerden;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial\rho}{\partial y} \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \quad (9)$$

yazılabilir. Burada gerekli türevler alınarak;

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho}{\partial x} &= \cos\phi, \frac{\partial\rho}{\partial y} = \sin\phi \\ \frac{\partial\phi}{\partial x} &= -\frac{1}{\rho}\sin\phi, \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{1}{\rho}\cos\phi \end{aligned} \quad (10)$$

bulunur. Bu ifadeler (9) denkleminde yazılırsa;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos\phi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\phi \frac{\partial}{\partial\rho} + \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \quad (11)$$

şeklinde elde edilir. Buradan;

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\rho} + \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\rho} + \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

yazılabilir. Yukarıdaki denklem-12'de parantezler açılarak;

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = & \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \\ & \frac{1}{\rho} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} = & \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho^2} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \\ & \frac{1}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} - \frac{1}{\rho^2} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (14)$$

şeklinde elde edilir. Yukarıdaki ifadelerde gerekli sadeleştirmeler yapılarak;

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = & \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{2}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \\ & \frac{2}{\rho^2} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \rho} \end{aligned} \quad (15)$$

olarak elde edilir. Böylece;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (16)$$

Laplas denkleminin silindirik koordinatlardaki ifadesi yukarıda bulduğumuz ifadeler yerlerine yazılarak;

$$\begin{aligned} \nabla^2 = & \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} [\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} [\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] + \\ & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} [\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (17)$$

şeklinde elde edilir. Burada;

$$[\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] = 1 \quad (18)$$

eşitliği kullanılarak denklem-17 ifadesi;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (19)$$

şeklinde elde edilir. Son elde ettiğimiz bu ifadeyi biraz düzenlersek;

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) = \frac{\partial}{\partial \rho} + \rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \quad (20)$$

yi şeklinde yazıp eşitliğin her iki tarafını ρ 'ya bölersek;

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \quad (21)$$

buradan;

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (22)$$

bulunur. Bu da ∇^2 ifadesinde yerine yazılarak;

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (23)$$

şeklinde elde edilmiş olur.

HAMİLTONYENİN DÜZENLENMESİ

Manyetik alan altında hareket eden parçacığın Hamiltonyeni;

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

ile verilir. Burada $\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ şeklinde tanımlanan momentum operatörü, \vec{A} vektör potansiyeli,

V ise skaler potansiyeldir. Hamiltonyeni düzenlemek için $(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2$ ifadesini alıp hesaplarsak;

$$(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 = P^2 + \frac{e^2}{c^2} A^2 + \frac{e}{c} \vec{P} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{P} \quad (2)$$

olarak yazılabilir. Burada $[\vec{P}, \vec{A}]$ komitasyonunu hesaplarsak;

$$[\vec{P}, \vec{A}] \Psi(\vec{r}) = (\vec{P} \vec{A} - \vec{A} \vec{P}) \Psi(\vec{r}) \quad (3)$$

Burada \vec{P} momentum operatörü yerine yazılırsa;

$$[\vec{P}, \vec{A}] = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \vec{A} \quad (4)$$

bulunur. Bu durumda $\vec{P} \vec{A} - \vec{A} \vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \vec{A}$ dır ve buradan;

$$\vec{P} \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \vec{A} + \vec{A} \vec{P} \quad (5)$$

yazılabilir. Bulduğumuz bu ifadeyi denklem-3'de yerine yazarsak;

$$(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 = P^2 + \frac{e^2}{c^2} A^2 - \frac{ei\hbar}{c} \vec{\nabla} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{P} \quad (6)$$

olarak yazılabilir. Bu durumda denklem-1 ile verilen Hamiltonyen ifadesi;

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \frac{1}{m^*} \left(\frac{e^2}{c^2} A^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\nabla} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{P} \right) + V(\rho, \phi) \quad (7)$$

olur. Burada;

$$P^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (8)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9)$$

dir. Bu durumda;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{1}{m^*} \left(\frac{e^2}{c^2} A^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\nabla} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{P} \right) + V(\rho, \phi) \quad (10)$$

olur. \vec{A} vektör potansiyeli için seçilen en uygun ayar;

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \quad (11)$$

dir. Burada \vec{A} ;

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ B_x & B_y & B_z \\ x & y & z \end{pmatrix} \quad (12)$$

olarak yazılırsa;

$$\begin{aligned} A_x &= \frac{1}{2} (zB_y - yB_z), \\ A_y &= \frac{1}{2} (xB_z - zB_x), \\ A_z &= \frac{1}{2} (yB_x - xB_y) \end{aligned} \quad (13)$$

olarak bulunur. Çalışmamızda manyetik alan z-yönünde uygulandığından;

$$B_x = 0, B_y = 0, B_z = B \quad (14)$$

olur. Bu ifadeler denklem-10 ile verilen Hamiltonyen ifadesinde yazılıp düzenlenirse;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{i\hbar eB}{2m^* c} (x-y) \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m^* c^2} (x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (15)$$

olarak yazılabilir. Burada Δ ifadesini

$$\Delta = -\frac{i\hbar eB}{2m^* c} (x-y) \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (16)$$

şeklinde tanımlar ve ifadeyi açarsak;

$$\Delta = -\frac{eB}{2m^* c} \left(i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial z} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (17)$$

şeklinde yazılabiliriz ve düzenlersek

$$\Delta = -\frac{eB}{2m^* c} \left(i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial z} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (18)$$

olur. Denklem-18'deki $i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ terimi açısal momentum operatörünün z bileşeninin negatif

işaretlisidir. Ayrıca $i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -P_x$, $i\hbar \frac{\partial}{\partial y} = -P_y$, $i\hbar \frac{\partial}{\partial z} = -P_z$ dir. Bu ifadelerde denklem-18'de

yerine yazılırsa ;

$$\Delta = -\frac{eB}{2m^* c} \left(-L_z - xP_x - xP_z + yP_y + yP_z \right) \quad (19)$$

olarak elde edilir. Komütasyon ifadesi $[P_x, x] = P_x x - x P_x = \frac{\hbar}{i}$ kullanılarak;

$$xP_x = P_x x + i\hbar \quad (20)$$

yazılabilir. Denklem-20 denklem-19'da kullanılırsa Δ ifadesi;

$$\Delta = \frac{eB}{2m^*c} L_z \quad (21)$$

haline getirilir. Denklem-21'i denklem-15'deki Hamiltonyen ifadesinde kullanılarak Hamiltonyen;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} (x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (22)$$

şeklinde yazılabilir.

SONSUZ POTANSİYEL KUYU İÇİN DALGA FONKSİYONUNUN ELDE EDİLMESİ

Düzgün manyetik alan altında silindirik kuantum telinde hidrojenik safsızlık da sonsuz kuyu durumu için; Hamiltoniyen aşağıdaki gibidir;

$$H = \frac{[\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A}(r)]^2}{2m^*} + V(\rho) \quad (1)$$

Burada \vec{P} elektronun momentumunu e elektronun yükünü m^* elektronun etkin külesini, \vec{A} vektör potansiyeli ve V skaler potansiyeli göstermektedir. Sonsuz kuyu için skaler potansiyel

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \rho \leq R \\ \infty, & \rho > R \end{cases} \quad (2)$$

ile verilir homojen dış manyetik alan belirli bir doğrultuda uygulanmaktadır. Manyetik alanın doğrultusuna bağlı olarak vektör potansiyeli

$$\vec{A} = \frac{\vec{B} \times \vec{r}}{2} \quad (3)$$

gibi verilir. Homojen dış manyetik alan ($\vec{B} = B_0 \hat{z}$) z doğrultusunda uygulanmaktadır. Silindirik koordinatlarda vektör potansiyelinin değeri $A_\rho = A_z = 0$, $A_\phi = \frac{B\rho}{2}$ vektör potansiyeli

$$\vec{A} = \frac{B\rho}{2} \vec{\phi} \quad (4)$$

\vec{P} operatörünün silindirik koordinatlardaki değerini türetilip Hamiltonyendeki $\frac{P^2}{2m^*}$ terimi yerine yazılırsa Hamiltonyeni silindirik koordinatlarda;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{i\hbar}{2} \omega \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m^* \omega^2 \rho^2 + V(\rho) \quad (5)$$

şekline dönüşür. Burada ω siklotron frekansı olup $\omega = \frac{eB_0}{m^* c}$ olarak tanımlanır. Böylece sistemin öz değer denklemi

$$H\psi(\rho, \phi, z) = E\psi(\rho, \phi, z) \quad (6)$$

şeklinde burda E öz değerleri elde edilen dalga fonksiyonu yerine yazılarak bulunabilir. Elde edilen dalga denkleminin $\psi(r)$ dalga denkleminin çözümleri aşağıdaki gibidir. Parçacık z yönünde serbest olarak hareket eder ve ayrıca ϕ yönünde parçacık 2π kadarlık dönme altında aynı noktaya gelir. dalga fonksiyonu;

$$\psi(r) = R(\rho) e^{im\phi} e^{ik_z z} \quad (7)$$

burada $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5, \dots$ vb'dir. Elektron z yönünde serbest parçacık gibi davranır enerji katkısı $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ kadardır. $\psi(r)$ dalga fonksiyonu denklemde yerine konulup $\xi = \frac{\rho^2}{2\alpha_c^2}$ dönüşümü yapılırsa;

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2} R(\xi) + \frac{d}{d\xi} R(\xi) + \left(\frac{-\xi}{4} + \frac{\varepsilon}{\hbar\omega} - \frac{m}{2} - \frac{m^2}{4\xi} \right) R(\xi) = 0 \quad (8)$$

dönüşür. Burada ince yapı sabiti $\alpha_c = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ şeklinde verilir. $\varepsilon = E - \frac{P_z^2}{2m^*}$ elde ettiğimiz denkleme asimptotik yaklaşım uygulayarak çözüm elde edilebilir.

Asimptotik çözümlerin elde edilmesi

$\xi \rightarrow 0$ ve $\xi \rightarrow \infty$ limit durumlarında denklem-8'in asimptotik çözümlerine bakalım

I: $\xi \rightarrow 0$ durumunda

Denklem-8'deki $-\frac{\xi}{4}$ terimi sıfır. Ayrıca $\frac{\varepsilon}{\hbar^2 \omega}$ ve $-\frac{m}{2}$ terimleri sonsuza giden $-\frac{m^2}{4\xi}$ terimi yanında ihmal edilebilir. Bu durumda $\xi \rightarrow 0$ için denklem;

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2} R(\xi) + \frac{d}{d\xi} R(\xi) - \frac{m^2}{4\xi} R(\xi) = 0 \quad (9)$$

şeklinde yazılır. Elde ettiğimiz bu diferansiyel denklem için; $R(\xi) = \xi^s$ şeklinde bir deneme çözümü önerelim ve bu çözüm denklem-9'da yerine yazalım. Bunun için;

$$\frac{d^2}{d\xi^2} R(\xi) = s(s-1)\xi^{s-2} \quad (10)$$

ve

$$\frac{d}{d\xi} R(\xi) = s\xi^{s-1} \quad (11)$$

olarak elde edilir ve denklem-9'da yerine yazılırsa;

$$\xi s(s-1)\xi^{s-1} + s\xi^{s-1} - \frac{m^2}{4\xi} \xi^{s-1} = 0 \quad (12)$$

şeklinde elde edilir. Bu ifade düzenlenirse;

$$s(s-1) + s - \frac{m^2}{4} = 0 \quad (13)$$

elde edilir. Buradan da $s^2 = \frac{m^2}{4}$ bulunur. Yani $s = \mp \frac{m}{2}$ çözümü fiziksel olmadığı için, elde edeceğimiz çözüm;

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

bulunur.

II. $\xi \rightarrow \infty$ durumunda

denklem-8'nin her iki yanını $\xi^{-\frac{|m|}{2}}$ 'e bölersek

$$\frac{d^2}{d\xi^2} R(\xi) + \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} R(\xi) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\varepsilon}{\hbar\omega\xi} - \frac{m}{2\xi} - \frac{m^2}{4\xi^2} \right) R(\xi) = 0 \quad (15)$$

olarak elde edilir. Bu son elde ettiğimiz denklem $\xi \rightarrow \infty$ durumunda $\frac{\varepsilon}{\hbar\omega\xi}$,

$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} R(\xi)$, $-\frac{m}{2\xi}$ ve $-\frac{m^2}{4\xi^2}$ terimleri sıfıra gider. Bu durumda geriye kalan ifade;

$$\frac{d^2}{d\xi^2} R(\xi) - \frac{1}{4} R(\xi) = 0 \quad (16)$$

şeklinindedir. Bu diferansiyel denklemin çözümü; $R(\xi) = e^{\pm \frac{\xi}{2}}$ şeklindedir bu çözümde $R(\xi) = e^{\frac{\xi}{2}}$ çözümü fiziksel değildir. çünkü $\xi \rightarrow \infty$ da fonksiyon sıfıra gitmelidir. bu nedenlerle son diferansiyel denklemin çözümü $R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}}$ olarak elde edilir. Asimptotik çözümleri elde ettiğimiz denklem-9'nun genel çözümü;

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-\frac{|m|}{2}} \xi(\xi) \quad (17)$$

şeklinde yazılabiliriz. $R(\xi)$ çözümü denklem-15'de yerine yazarsak;

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \xi(\xi) + (|m|+1+\xi) \frac{d}{d\xi} \xi(\xi) + \left(\frac{\varepsilon}{\hbar\omega} - \frac{m+|m|+1}{2} \right) \xi(\xi) = 0 \quad (18)$$

elde edilir. Yukarıdaki diferansiyel denklemde $z = \xi$, $b = |m|+1$ ve $a = \left(-\frac{\varepsilon}{\hbar\omega} + \frac{m+|m|+1}{2} \right)$ olarak

alınırsa denklem-19 ile verilen Kummer Diferansiyel Denklemine dönüşür.

$$\frac{d^2}{dz^2}W + (b-z)\frac{d}{dz}W - aW = 0 \quad (19)$$

Bu diferansiyel denklemin çözümü Hipergeometrik Fonksiyonlar cinsinden yazılır. Bu fonksiyonlar aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\xi(\xi) = {}_1F_1(a, b, z) = {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) \quad (20)$$

Kummer Diferansiyel Denkleminin çözümleri elde edildikten sonra denklem-17'deki yerine yazılırsa,

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-\frac{|m|}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, m+1; \xi) \quad (21)$$

dalga fonksiyonu elde edilmiş olur. Taban durum incelendiği için $m=0$ ve $l=1$ alınır böylece dalga fonksiyonu şu hali alır.

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) \quad (22)$$

sonsuz potansiyel kuyu için dalga fonksiyonu elde edilmiş olur.

SONSUZ KUYU DURUMU İÇİN, NORMALİZASYON SABİTİNİN ELDE EDİLMESİ

Normalizasyon sabiti dalga fonksiyonunun normalize edilmesiyle bulunur

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(r)|^2 d\rho d\phi dz = 1 \quad (1)$$

Dalga fonksiyonu

$$\psi(r) = e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda|\vec{r}-\vec{r}_0|} \quad (2)$$

olarak seçilir. Burada

$$|\vec{r}-\vec{r}_0| = \sqrt{\rho^2 - \rho_0^2 - 2\rho\rho_0 \cos(\phi - \phi_0) + z^2} \quad (3)$$

ρ_0 ve $z_0 = 0$ katkı iyonu merkezde kabul edersek dalga fonksiyonu şu hali alır.

$$\psi(r) = e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \quad (4)$$

normalizasyon koşulundan yararlanarak N aşağıdaki gibi elde edilir;

$$N^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz = 1 \quad (5)$$

$$4\pi N^2 \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \int_0^{\infty} e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz = 1 \quad (6)$$

$$-2\pi N^2 \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \frac{d}{d\lambda} \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz = 1 \quad (7)$$

Yukarıdaki denklemde

$$K_0(2\rho_0\lambda) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (8)$$

Küresel Bessel fonksiyonudur. Denklem-7'de yerine yazarsak;

$$2\pi N^2 \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho = 1 \quad (9)$$

$$N^{-2} = 2\pi \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho = 1 \quad (10)$$

$$A = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (11)$$

olarak alınırsa normalizasyon sabiti:

$$N^{-2} = 2\pi \frac{d}{d\lambda} A \quad (12)$$

biçiminde yazılabilir.

Sonsuz kuyuda Hamiltonyenin potansiyel enerji terimi olan $-\frac{e^2}{\epsilon_0\sqrt{\rho^2+z^2}}$ fonksiyonu alınarak ve dielektrik sabiti:

$$\epsilon = \begin{cases} \epsilon_0, & 0 \leq \rho \leq R \\ \infty, & \rho > R \end{cases} \quad (13)$$

olarak tanımlanır.

Potansiyelin beklenen değeri aşağıdaki gibi elde edilir

$$\langle V \rangle = -N^2 e^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\epsilon} \rho e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \frac{1}{\sqrt{\rho^2+z^2}} e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz \quad (14)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 \int_0^R \int_0^{\infty} \frac{1}{\epsilon} \rho e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \frac{1}{\sqrt{\rho^2+z^2}} e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz \quad (15)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 \int_0^R \frac{1}{\epsilon} e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (16)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 \int_0^R \frac{1}{\epsilon} e^{\frac{-\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (17)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 e^2 A \quad (18)$$

$$A = \int_0^R \frac{1}{\epsilon} \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (19)$$

elde edilir.

Benzer şekilde kinetik enerjinin beklenen değeri ek2'de olduğu gibi

$$\langle T \rangle = \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (20)$$

olarak elde edilir. $\langle T \rangle$ Kinetik enerjinin beklenen değeri ve $\langle V \rangle$ potansiyel enerjinin beklenen değeri olmak üzere bu değerler denklem-21'de yazılırsa;

$$\langle H(R, B) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (21)$$

$$\langle H(R, B) \rangle = \hbar \omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - 4\pi N^2 \frac{e^2}{\epsilon_0} A \quad (22)$$

$$E = E_B + \langle H(R, B) \rangle \quad (23)$$

hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisi $E_B(R, B)$ Coulomb etkileşme terimi olmaksızın elde edilen sistemin taban durumu enerjisi $E = \hbar \omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right)$ değerinden Coulomb etkileşme terimi varken ki taban durum enerjisi $\langle H(R, B) \rangle$ çıkarılmasıyla elde edilir. Buna göre bağlanma enerjisi

$$E_B = E_0 - \langle H(R, B) \rangle \quad (24)$$

$$E_B = \hbar \omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) - \left[\hbar \omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - 4\pi N^2 \frac{e^2}{\epsilon_0} A \right] \quad (25)$$

$$E_B = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + 4\pi N^2 \frac{e^2}{\epsilon_0} A \quad (26)$$

$$N^{-2} = 2\pi \frac{d}{d\lambda} A \quad (27)$$

$$N^2 = \frac{1}{2\pi \frac{dA}{d\lambda}} \quad (28)$$

$$E_B = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + 4\pi \frac{1}{2\pi \frac{dA}{d\lambda}} \frac{e^2}{\epsilon_0} A \quad (29)$$

$$E_B = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + 2\pi \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{A}{d\lambda} \quad (30)$$

ifadeyi boyutsuz hale getirelim her tarafı Ry bölümlim $\rho = tR$ Değişken değiştirmesi yapılarak Bohr yarıçapı ve $GaAs / Al_x Ga_{1-x} As$ için değeri $98 A^0$ 'dır.

$$a_B = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m^* e^2} \quad (31)$$

$$R_Y = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_B}$$

Rydberg sabiti olup $GaAs / Al_x Ga_{1-x} As$ için değeri 5,8 meV'dur. Ayrıca her iki taraf R_Y ile normalize edilerek eşitlik boyutsuz hale getirilmiştir. $\rho = tR$ Değişken değiştirmesi yapılarak denklem-30 boyutsuz nicelikler cinsinden şöyle ifade edilir. ξ_R için dönüşüm yapılırsa;

$$\xi_R = \frac{R^2}{2\alpha_c^2} \quad (32)$$

$$t^2 \xi_R = \frac{t^2 R^2}{2\alpha_c^2}$$

$$A = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0 \lambda) d\rho \quad (33)$$

$$C = \int_0^1 R t e^{-t^2 \xi_R} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R) K_0(2\rho_0 \lambda) d\rho \quad (34)$$

$$\underline{E}_B = \frac{E_B}{R_Y} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \frac{2\epsilon_0 a_B}{e^2} + 2\pi \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{2\epsilon_0 a_B}{e^2} \frac{C}{d\lambda} \quad (35)$$

$$\underline{E}_B = \frac{E_B}{R_Y} = -\frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m^* e^2} \lambda^2 a_B + 4\pi a_B \frac{C}{d\lambda} \quad (36)$$

dir. Böylece denklem-36'da E_B , λ 'nın ve dielektrik sabitinin fonksiyonu olarak elde edilir. Buradan varyasyon parametresine göre E_B 'nin minimum değeri istenilen taban durumu bağlanma

enerjisini verir. Bu sistemle farklı tel yarıçapı ve manyetik alan değeri ve dielektrik sabitinin değışmesi için E_B değeri hesaplanabilir. Bohr yarıçapını denklem 36'da yerine yazarsak

$$E_B(R, B) = -\left(\frac{\lambda \hbar^2}{m^* e^2} \epsilon_0\right)^2 - \frac{4 \hbar^2}{m^* e^2} \epsilon_0 \frac{C}{d\lambda} \quad (37)$$

ifadesi düzenlenirse dielektrik sabitine bağı olarak bağlanma enerjisi dielektrik sabitine ikinci dereceden bir ifade olarak etkilidir

Ek 2**KİNETİK ENERJİNİN BEKLENEN DEĞERİ:**

$$\langle T \rangle = \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* T \psi d\rho d\phi dz \quad (1)$$

$$\psi = e^{ikz} J_0(r_{01} \rho) \quad (2)$$

olarak Bessel fonksiyonları yardımı ile dalga fonksiyonunu yazar ve kinetik enerjinin beklenen değerini parça parça inceleyip sonuçları yazalım

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (3)$$

ifadesinde taban durumu için m=0 da ikinci terim sıfır olur.

$$T\psi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} N \left\{ \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{ikz} J_0(r_{01} \rho) \right\} \quad (4)$$

ifadeye çarpımın türevini uygularsak

$$T\psi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} N \left\{ \left[\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) J_0(r_{01} \rho) \right] e^{ikz} + \left[\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{ikz} \right] J_0(r_{01} \rho) \right\} \quad (5)$$

$$T\psi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} N \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{ikz} J_0(r_{01} \rho) - k^2 J_0(r_{01} \rho) e^{ikz} \quad (6)$$

$$\langle T \rangle = \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho N^* e^{ikz} J_0(r_{01} \rho) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} N e^{ikz} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) J_0(r_{01} \rho) - k^2 J_0(r_{01} \rho) \right) e^{ikz} d\rho d\phi dz \quad (7)$$

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0(r_{01} \rho) \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) J_0(r_{01} \rho) d\rho dz + \frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} k^2 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0^2(r_{01} \rho) d\rho dz \quad (8)$$

N normalizasyon sabitini bulalım

$$\iiint_{\text{tüm uzay}} \psi^* \psi d\tau = 1 \quad (9)$$

$$|N|^2 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0^2(r_{01}, \rho) d\rho dz = 1 \quad (10)$$

$$\frac{1}{|N|^2 2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0^2(r_{01}, \rho) d\rho dz \quad (11)$$

T'nin beklenen değerinde ikinci toplam ifadesinde yukarıdaki ifade konulursa

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} k^2 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0^2(r_{01}, \rho) d\rho dz = \\ \frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} k^2 2\pi \frac{1}{|N|^2 2\pi} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \end{aligned} \quad (12)$$

T nin beklenen değerinde ilk toplam ifadesin kullanılırsa

$$-\frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0(r_{01}, \rho) \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) J_0(r_{01}, \rho) d\rho dz = \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 J_0(r_{01}, \rho)}{\partial \rho^2} &= k_{10}^2 \left(\frac{J_2(r_{01}, \rho) - J_0(r_{01}, \rho)}{2} \right) \\ \frac{\partial J_0(r_{01}, \rho)}{\partial \rho} &= k_{10} \left(\frac{J_2(r_{01}, \rho) - J_0(r_{01}, \rho)}{2} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

yukarıdaki ifadeler kullanarak

$$-\frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0(r_{01}, \rho) \left(\frac{1}{2} J_2(r_{01}, \rho) - J_0(r_{01}, \rho) \right) + J_0(r_{01}, \rho) d\rho dz = \quad (15)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2 |N|^2}{2m} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0(r_{01}, \rho) \left(\frac{1}{2} J_2(r_{01}, \rho) - J_0(r_{01}, \rho) \right) + \\ + \left(\frac{J_0(r_{01}, \rho) - J_2(r_{01}, \rho)}{2} \right) k_{10}^2 J_0(r_{01}, \rho) d\rho dz \end{aligned} \quad (16)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}|N|^2 2\pi(-k_{10}^2) \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^R \rho J_0^2(r_{01}, \rho) d\rho dz = \quad (17)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}|N|^2 2\pi(-k_{10}^2) \frac{1}{|N|^2 2\pi} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{10}^2 \quad (18)$$

ifadeleri birleřtirirsek

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_{01}^2 \quad (19)$$

elde edilir burada bizim probleme benzetelim taban durumu $\hbar\omega_c(a_{01} + \frac{1}{2})$ ve dalga fonksiyonumuzda k_{01} λ olarak alınırsa ifade

$$\langle T \rangle = \hbar\omega_c(a_{01} + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (20)$$

řeklinde dönüşür.

Ek3 SONLU POTANSİYEL KUYU İÇİN HESAPLAR

Sonlu kuyu için durum sonsuz kuyuya benzer biçimde; uygulanan manyetik alan altında silindirik kuantum telinde hidrojenik safsızlık Hamiltoniyeni

$$H = \frac{\left[\bar{P} + \frac{e}{c} \bar{A}(r) \right]^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\varepsilon |r - r_0|} + V(\rho, \phi) \quad (1)$$

biçiminde yazılır. Denklem-1'deki elektriksel potansiyeli $V(\rho, \phi)$ sonlu kuyu için

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} 0, & \rho \leq R \\ V_0, & \rho > R \end{cases} \quad (2)$$

ile tanımlayalım. Kuyu içinde yani $\rho < R$ dalga fonksiyonu çözümü

$$\psi_{ic}(\rho, \phi, z) = e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{|m|}, |m| + 1; \xi) \quad (3)$$

elde edilir. Enerji öz değeri de

$$E = \frac{P_z^2}{2m^*} + \hbar \omega_c \left[a_{|m|} + \frac{m + |m| + 1}{2} \right] \quad (4)$$

burada $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ $l = 1, 2, 3, \dots$ 'dir

kuyu dışında ($\rho > R$) ise dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi elde edilir. Hamiltoniyeni silindirik koordinatlarda,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{i\hbar}{2} \omega \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m^* \omega^2 \rho^2 + V(\rho) \quad (5)$$

elde edilir. $V(\rho) = V_0$ alınır.

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2} R(\xi) + \frac{d}{d\xi} R(\xi) + \left(\frac{-\xi}{4} + \frac{\varepsilon}{\hbar \omega} - \frac{m}{2} - \frac{m^2}{4\xi} \right) R(\xi) = 0 \quad (6)$$

$$\varepsilon = E - \frac{P_z^2}{2m^*} - V_0 \quad (7)$$

olur. Sonsuz kuyu için yapılan asimptotik çözümler tekrarlanır. sonuçta Kummer diferansiyel denklemi çıkar.

$$\frac{d^2}{dz^2} W + (b-z) \frac{d}{dz} W - aW = 0 \quad (8)$$

Kummer diferansiyel denklemin çözümü hipergeometrik fonksiyonları verir. Bu fonksiyonlar aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\xi(\xi) = U_1(a, b, z) = U_1(-a'_{01}, 1; \xi) \quad (9)$$

$$R(\xi) = N_1 e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{-\frac{|m|}{2}} U_1(-a'_{01}, m+1; \xi) \quad (10)$$

taban durum incelendiği için $m=0$ ve $l=1$ alınır. Böylece dalga fonksiyonu

$$\psi_{dis}(r) = N_1 e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a'_{01}, 1; \xi) \quad (11)$$

böylece sonlu potansiyel bariyer için dalga fonksiyonunu elde edilmiş olur. N_1 normalizasyon katsayısını sınır şartından

$$\frac{d\psi_{i\zeta}(R)}{d\rho} = \frac{d\psi_{dis}(R)}{d\rho} \quad (12)$$

$$\psi_{dis}(r) = N_1 e^{-\frac{\xi_R}{2}} U(-a'_{01}, 1; \xi_R) = N e^{-\frac{\xi_R}{2}} {}_1F_1(-a_{|m|1}, |m|+1; \xi_R) \quad (13)$$

$$N_1 = N \frac{{}_1F_1(-a_{|m|1}, |m|+1; \xi_R)}{U(-a'_{01}, 1; \xi_R)} \quad (14)$$

'dır ψ_{dis} dalga fonksiyonunda yerine yazalım.

$$\psi_{dış}(\vec{r}) = N \frac{{}_1F_1(-a_{|m|}, |m|+1; \xi_R)}{U(-a'_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a'_{01}, 1; \xi) \quad (15)$$

enerji öz değerleri

$$E = \frac{P^2}{2m^*} + V_0 + \hbar\omega_c \left[a_{|m|} + \frac{m+|m|+1}{2} \right] \quad (16)$$

burada $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, l=1, 2, 3, \dots$ değerini alır.

Sonlu kuyu durumu için normalizasyon sabitini hesaplayalım.

$$\psi_{ic}(\vec{r}) = N e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \quad (17)$$

$$\psi_{dış}(\vec{r}) = N \frac{{}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi)}{U(-a'_{01}, 1; \xi)} e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a'_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \quad (18)$$

normalizasyon şartından

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r})|^2 \rho d\rho d\phi dz = 1 \quad (19)$$

tel içindeki normalizasyon sabitini bulalım.

$$N^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz = 1 \quad (20)$$

$$4\pi N^2 \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \int_0^{\infty} e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz = 1 \quad (21)$$

$$-2\pi N^2 \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) \frac{d}{d\lambda} \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho dz = 1 \quad (22)$$

Yukarıdaki denklemde

$$K_0(2\rho_0\lambda) = \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (23)$$

Küresel Bessel fonksiyonudur. Denklem-22'de yerine yazarsak;

$$-2\pi N^2 \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho = 1 \quad (24)$$

halini alır.

$$N^{-2} = -2\pi \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho = 1 \quad (25)$$

$$K = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (26)$$

$$N^{-2} = -2\pi \frac{d}{d\lambda} K \quad (27)$$

elde edilir. Aynı işlemleri tel dışındaki dalga fonksiyonu için yaparsak,

$$\begin{aligned} N^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz \\ + N^2 \int_R^\infty \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz = 1 \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} 4\pi N^2 \left(\int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^\infty e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \right. \\ \left. + \int_R^\infty \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^\infty e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \right) = 1 \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} -2\pi N^2 \frac{d}{d\lambda} \left(\int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \right. \\ \left. + \int_R^\infty \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} \rho e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \right) = 1 \end{aligned} \quad (30)$$

denklem-23'de küresel Bessel fonksiyonun tanımından yararlanılırsa

$$M = \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi)} \int_R^\infty \rho e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) K(2\rho_0\lambda) d\rho \quad (31)$$

normalizasyon sabiti ařağıdaki gibi olur.

$$N^{-2} = -2\pi \frac{d}{d\lambda} (K + M) \quad (32)$$

dielektrik sabiti deęiřimi sonlu kuyu iin kuyu ii ve dıřında farklı deęerler alacaktır

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_0, & 0 \leq \rho \leq R \\ \varepsilon_1, & \rho > R \end{cases} \quad (33)$$

sonlu kuyu iin potansiyelin beklenen deęeri

$$\langle V \rangle = \langle V \rangle_{\rho < R} + \langle V \rangle_{\rho > R} \quad (34)$$

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \psi_{i\zeta}^*(\vec{r}) V \psi_{i\zeta}(\vec{r}) \rho d\rho d\phi dz = 1 \quad (35)$$

dalga fonksiyonu yerine yazılırsa

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = \frac{-N^2}{\varepsilon_0} \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \rho e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \frac{1}{\sqrt{\rho^2+z^2}} e^{-\frac{\xi}{2}} {}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} d\rho d\phi dz \quad (36)$$

elektron ve safsızlık iyonu aynı yerde kabul edebiliriz. ($\phi_e = \phi_h$) buna gore denklem

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) d\rho \int_0^\infty \frac{e^{-2\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \quad (37)$$

$$\langle V \rangle_{\rho < R} = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho\lambda) d\rho \quad (38)$$

$$K = \int_0^R \rho e^{-\xi} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho\lambda) d\rho \quad (39)$$

potansiyelin beklenen değeri iç bölgede:

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} K \quad (40)$$

$$\langle V \rangle_{\rho > R} = \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{dis}^*(\vec{r}) V \psi_{dis}(\vec{r}) \rho d\rho d\phi dz = 1 \quad (41)$$

dalga fonksiyonu yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\rho > R} &= \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} N \frac{{}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi)}{U(-a_{01}, 1; \xi)} e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \left(-\frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{\rho^2+z^2}}\right) \\ &\quad N \frac{{}_1F_1(-a_{01}, 1; \xi)}{U(-a_{01}, 1; \xi)} e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \rho d\rho d\phi dz \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\rho > R} &= -\frac{e^2}{\varepsilon_1} N^2 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) \frac{e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} \rho d\rho d\phi dz + \\ &\quad N^2 V_0 \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} \rho d\rho d\phi dz \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\rho > R} &= -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_1} N^2 \int_0^R \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) \rho d\rho \int_0^{\infty} \frac{e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz - \\ &\quad -2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho\lambda) \rho d\rho \\ &\quad \int_0^{\infty} \frac{e^{-\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\sqrt{\rho^2+z^2}} dz \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\rho > R} &= -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_1} N^2 \int_0^R \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho\lambda) \rho d\rho \\ &\quad -2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} \int_0^R \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} \\ &\quad U^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho\lambda) \rho d\rho \end{aligned} \quad (45)$$

$$M = \int_0^R \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} e^{-\xi} U^2(-a_{01}, 1; \xi) K_0(2\rho\lambda) \rho d\rho \quad (46)$$

olarak tanımlanırsa potansiyelin beklenen değeri

$$\langle V \rangle_{\rho>R} = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_1} N^2 M - 2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} M \quad (47)$$

sistemin potansiyellerinin beklenen değerleri

$$\langle V \rangle = \langle V \rangle_{\rho<R} + \langle V \rangle_{\rho>R} \quad (48)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon} K - \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} N^2 M - 2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} M \quad (49)$$

denklem düzenlenirse

$$\langle V \rangle = -4\pi N^2 \frac{e^2}{\varepsilon} [K + M] - 2\pi N^2 V_0 \frac{d}{d\lambda} M \quad (50)$$

$$\langle V \rangle = -4\pi \left(-\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \right) \frac{e^2}{\varepsilon} [K + M] - 2\pi \left(-\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \right) V_0 \frac{d}{d\lambda} M \quad (51)$$

$$\langle V \rangle = \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K + M]}{\frac{d}{d\lambda}(K + M)} + \frac{V_0}{\frac{d}{d\lambda}(K + M)} \frac{d}{d\lambda} M \quad (52)$$

olarak bulunur. Kinetik enerjinin beklenen değeri;

$$\langle T \rangle = -2\pi N^2 \left[\hbar \omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dK}{d\lambda} + \hbar \omega_c \left(a'_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dM}{d\lambda} \right] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (53)$$

$$N^{-2} = -2\pi \frac{d}{d\lambda} (K + M) \quad (54)$$

$$N^2 = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}(K + M)} \quad (55)$$

$$\langle T \rangle = -2\pi \left(-\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \right) \left[\hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dK}{d\lambda} + \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dM}{d\lambda} \right] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (56)$$

$$\langle T \rangle = \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \left[\hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dK}{d\lambda} + \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dM}{d\lambda} \right] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (57)$$

$$\langle T \rangle = \hbar\omega_c \left[\frac{\left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dK}{d\lambda}}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} + \frac{\left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dM}{d\lambda}}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \right] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (58)$$

$$\langle T \rangle = \hbar\omega_c \left[\frac{a_{01} \frac{dK}{d\lambda} + \frac{1}{2} \frac{dK}{d\lambda} + a_{01} \frac{dM}{d\lambda} + \frac{1}{2} \frac{dM}{d\lambda}}{\frac{d}{d\lambda}[K+M]} \right] + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (59)$$

$$V_0 = \hbar\omega_c [a_{01} - a_{01}'] \quad (60)$$

$$\langle T \rangle = \left[\hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) - V_0 \right] \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}[K+M]} \frac{dM}{d\lambda} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \quad (61)$$

$$\langle H(R, B) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \langle H(R, B) \rangle &= \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) - V_0 \frac{1}{\frac{d}{d\lambda}[K+M]} \frac{dM}{d\lambda} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + \\ &+ \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K+M]}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} + \frac{V_0}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \frac{d}{d\lambda} M \end{aligned} \quad (63)$$

$$\langle H(R, B) \rangle = \hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 + \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K+M]}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \quad (64)$$

$$E_B = E_0 - \langle H(R, B) \rangle \quad (65)$$

$$E_b = \hbar\omega_c(a_{01} + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_c(a_{01} + \frac{1}{2}) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K+M]}{\frac{d}{d\lambda}(K+M)} \quad (66)$$

bağlanma enerjisi

$$E_b(R, B) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 - \frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{[K+M]}{\frac{d[K+L]}{d\lambda}} \quad (67)$$

olarak elde edilir. Bağlanma enerjisini Rydberg sabiti cinsinden yazılır ve $\rho = tR$ dönüşümü yapılırsa;

$$E_b(R, B) = \frac{E_b(R, B)}{Ry} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \lambda^2 \frac{2\varepsilon a_B}{e^2} - \frac{2e^2}{\varepsilon_0} \frac{2\varepsilon a_B}{e^2} \frac{[Q+P]}{\frac{d[Q+P]}{d\lambda}} \quad (68)$$

$$E_b(R, B) = -(\lambda a_B)^2 - 4a_B \frac{[Q+P]}{\frac{d[Q+P]}{d\lambda}} \quad (69)$$

elde edilir. Burada K ve M fonksiyonları dönüşüm sonucunda aşağıdaki gibi tanımlanan Q ve P' ye dönüşür.

$$Q = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^1 t dt e^{-t^2 \xi_R} {}_1F_1^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R^2) K_0(2\lambda Rt) \quad (70)$$

$$P = \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{{}_1F_1^2(-a_{01}, 1; \xi_R)}{U^2(-a_{01}, 1; \xi_R)} \int_0^\infty t dt e^{-t^2 \xi_R} U^2(-a_{01}, 1; t^2 \xi_R) K_0(2\lambda Rt) \quad (71)$$

$$E_b(R, B) = -(\lambda a_B)^2 - 4a_B \frac{[Q+P]}{\frac{d[Q+P]}{d\lambda}} \quad (72)$$

Bohr yarıçapı denklemde yerine yazılırsa

$$E_b(R, B) = -(\lambda \frac{\varepsilon \hbar^2}{m^* e^2})^2 - 4 \frac{\varepsilon \hbar^2}{m^* e^2} \frac{[Q+P]}{\frac{d[Q+P]}{d\lambda}} \quad (73)$$

elde edilir.