

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ÇİFT PARABOLİK KUŞATMA ALTINDA KUANTUM SİSTEMİ ELEKTRONİK ENERJİ DÜZEYLERİ

Mehmet Osman USLU

Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Haziran-2006

Danışman: Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ

Bu çalışmada GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs kuantum teli üzerine manyetik alan uygulanması ile sistemde oluşturulan parabolik kuşatmaya ek olarak uzaysal kuşatma da parabolik seçilerek ikincil bir parabolik kuşatma etkisi yaratılmış ve oluşan sistemin simetrisi hiç bozulmadan yalnızca iki parabolik potansiyel arasında oluşan (step) yükseklik farkından yararlanarak, elektronlar, iki parabolün üst üste (overlapped) geldiği yerde lokalize edilerek bu yapının enerji düzeyleri hesaplanmıştır.

ANAHTAR KELİMELER: Kuantum Teli; Çift Parabolik Kuşatma

SUMMARY

MSc Thesis

**IN THE PRESENCE OF DOUBLE PARABOLIC SURROUNDING QUANTUM
SYSTEM ELECTRONIC ENERGY LEVELS**

Mehmet Osman USLU

Cumhuriyet University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

June-2006

Supervisor: Prof. Dr. Sezai ELAĞÖZ

In this study, we calculated the energy spectra of an electron GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum wire trapped between two parabolic confinement. One from the applied magnetic field and other from the by chosen spatial confinement as another parabolic confinement without breaking the symmetry

KEY WORDS: Quantum Wire; Double Parabolic Surrounding

TEŐEKKÜR

Bu tez alıőmasında, tez konusunun seilmesinden tezin hazırlanmasının her aőamasında bilgi ve deneyimlerinden yararlandıėım danıőman hocam Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ' e teőekkür ederim. Ayrıca tüm okul hayatım boyunca maddi ve manevi desteklerini benden esirgemeyen aileme ve yardımlarını gördüğüm tüm arkadaşlarıma da teőekkür ederim.

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda $T = 0$ °K için tipik bant yapıları.....	3
Şekil 3.1 $T = 0$ °K sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin bant yapısı.....	4
Şekil 3.2 a) Dolaysız materyallerde geçişlerin gösterimi.....	5
Şekil 3.2 b) Dolaylı materyallerde geçişlerin gösterimi.....	5
Şekil 3.3 a) GaAs' da L, X, Γ ile verilen süreksizliklerinin şematik gösterimi.....	6
Şekil 3.3 b) GaAs'da L, X, Γ , ile verilen süreksizliklerinin şematik gösterimi.....	6
Şekil 3.4 a) GaAs kristali.....	7
Şekil 3.4 b) GaAs kristalinin bant yapısı.....	7
Şekil 3.5 As katkılanmış Si kristali.....	8
Şekil 3.6 As katkılanmış Si kristalinin enerji bant diyagramı.....	8
Şekil 3.7 B katkılanmış Si kristali.....	9
Şekil 3.8 B katkılanmış Si kristalinin enerji bant diyagramı.....	9
Şekil 4.1. a) Birbirine eklenmiş farklı iki yarıiletkenin bant diyagramı.....	12
Şekil 4.1. b) Farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapıdaki bant süreksizlikleri. ΔE_c iletkenlik, ΔE_v valans bandında oluşan süreksizlikleri.....	12
Şekil 5.1. GaAs-Ga _{1-x} Al _x As eklemi örneği.....	16
Şekil 5.2. GaAs kuantum kuyusunun elektronik yapısı. $E_g(\text{GaAs})$ külçe GaAs'ın yasak band aralığıdır. İletkenlik bandında kuşatılmış en düşük enerjili seviye E_{ci} 'dir ve külçe GaAs'ın iletkenlik bant sınırından daha yukarıdır.....	17
Şekil 6.1 a) Parabolik potansiyel.....	19
Şekil 6.1 b) Manyetik alan etkisiyle parabolik potansiyel.....	19
Şekil 6.1 c) Manyetik alanın büyük değerlerinde parabolik potansiyel.....	19
Şekil 6.2 Silindirik kuantum telinin şematik gösterimi.....	20
Şekil 6.3 Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için [GaAs içinde Rydberg sabiti R_B 5.8	

meV ve a_B Bohr yarıçapı $98A^\circ$]çift parabolik kuşatma altında manyetik alanla enerji değişimi.....	25
Şekil 6.4. $R=a_B$ için bazı manyetik alan değerlerinde dalga fonksiyonunun karesinin çizimi. a) $B = 100$ kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.....	26
Şekil 6.4. b) $B = 200$ kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.....	26
Şekil 6.4 c) $B = 400$ kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.....	26
Şekil 6.5. Al konsantrasyonunun $x=0.2$ değeri için $B=50$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs için Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı $98 A^\circ$].....	27
Şekil 6.6. Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için $B = 240$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs için Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı $98 A^\circ$].....	28
Şekil 6.7 Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için [GaAs içinde Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı $98 A^\circ$]çift parabolik kuşatma altında manyetik alanla enerji değişimi.....	29
Şekil 6.8. $R=a_B$ için bazı manyetik alan değerlerinde dalga fonksiyonunun karesinin çizimi. a) $B = 160$ kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.....	30
Şekil 6.8 b) $B = 280$ kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.....	30
Şekil 6.8 c) $B = 420$ kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.....	30
Şekil 6.9. Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için $B = 50$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs içinde Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı $98 A^\circ$].....	31
Şekil 6.10. Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için $B = 240$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [Ryberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı $98 A^\circ$].....	32

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 1. Bazı önemli A-B yarıiletken heteroyapıların bant boşluğu enerjileri ve valans bant süreksizlikleri. Eğer A yarıiletkeninin valans bant zirvesi B yarıiletkeninkinden yüksekse, değerlik (valans) bant süreksizliği ΔE_v pozitifdir.13

Çizelge 2. Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için geçişlerin gözlemlendiği manyetik alan ve Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri. a) Yarıçapın $R = a_B, 2a_B, 3a_B, 5a_B$ değerleri için geçişlerin başladığı manyetik alanlar, b) Manyetik alanın $B = 50$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri, c) Manyetik alanın $B = 240$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri.....34

Çizelge 3. Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için geçişlerin gözlemlendiği manyetik alan ve Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri. a) Yarıçapın $R = a_B, 2a_B, 3a_B, 5a_B$ değerleri için geçişlerin başladığı manyetik alanlar, b) Manyetik alanın $B = 50$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri, c) Manyetik alanın $B = 240$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri.....35

1. GİRİŞ

Yarıiletkenler, elektronik devre elemanları yapımında sıkça tercih edilirler. Bunun temel nedenleri, çeşitli özelliklerdeki yarıiletken devre elemanlarının çok küçük hacimler içerisine yerleştirilebilir olması, söz konusu yarıiletkenlerin yasak bant aralıklarının çeşitli uygulamalar için elverişli bölgede olması ve istenilen özelliklerde bir devre elemanı yapılmasına imkan vermesidir. Yarıiletkenlerle yapılan devre elemanlarının özellikle fabrikasyon üretimine uygun olmaları ve maliyetlerinin ucuz olması yarıiletken teknolojisine olan ilgiyi daha da artırmaktadır.

Yeni elektronik devre elemanlarının modellenmesi, sistemlerin ayarlanabilir fiziksel özellikleri temel alınarak yapılmaktadır. Yarıiletkenlerin kristal yapılarının incelenmesi sayesinde, yarıiletkenlerin elektronik ve optik özellikleri belirlenebilmektedir. Bu nedenle bilim adamları çalışmalarını bu yapay modeller üzerinde yoğunlaştırmışlardır. MBE (Molecular Beam Epitaxy) gibi büyütme teknikleri yarıiletken fiziği ve teknolojisinde önemli etkiler yapmıştır. Epitaksiyel olarak yapılan büyütme yöntemleri ile son derece değişik yapılar oluşturulabilmektedir. Örneğin, iki $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarıiletken tabakası arasında GaAs tabakası oluşturularak tekli kuantum çukuru, bu tabakaların periyodik tekrarlanması halinde çoklu kuantum çukurları veya tabaka kalınlıkları ayarlanarak oluşturulabilen süper örgüler, bu yöntemlerle kolayca elde edilebilmektedir.

Kuantum mekaniksel sistemlerde yapının özellikleri, yapının boyutuna bağlı olarak oldukça farklı davranışlar sergilemektedir. Yapılan çalışmalarda önce yük taşıyıcılarının bir yöndeki hareketleri kısıtlanarak iki-boyutlu kuantum kuyusu yapıları geliştirilmiştir. Daha sonra ise kuşatılma boyutları artırılarak bir boyutlu kuantum telleri ve sıfır-boyutlu kuantum noktaları yapılmıştır. Elektron hareketinin üç boyuttan iki, bir, hatta sıfır boyuta indirgenğinde elde edilen sistemin elektronik ve optik özelliklerinin teknolojiye büyük kullanım alanları açacak kadar önemli değişikliğe uğradığı son onbeş yılda yapılan araştırmalar sonucunda ortaya çıkmıştır. Bunun temel nedeni çarpışmaların azalması ve potansiyel etkileşmelerin sadeleşerek önemsenebilir bağlanmalara yol açmasıdır. Geliştirilen sistemlerde boyut azaldıkça yani kuşatma arttıkça fiziksel özellikleri belirleyen parametreler de ayarlanabilir duruma gelmektedir.

Bu sayede özel fonksiyonlara sahip aletler tasarlanmaktadır. Düşük boyutlu sistemlerin külçe yapılara göre üstünlüğü, bu sistemlerdeki boyut farklılığından kaynaklanır. Düşük boyutlu sistemlerde son derece dar ve iyi tanımlanmış enerji düzeylerini elde etmek mümkündür. Buna ek olarak bu sistemlerde elektron (veya boşluk) yoğunluğu istenildiği gibi değiştirilebilir.

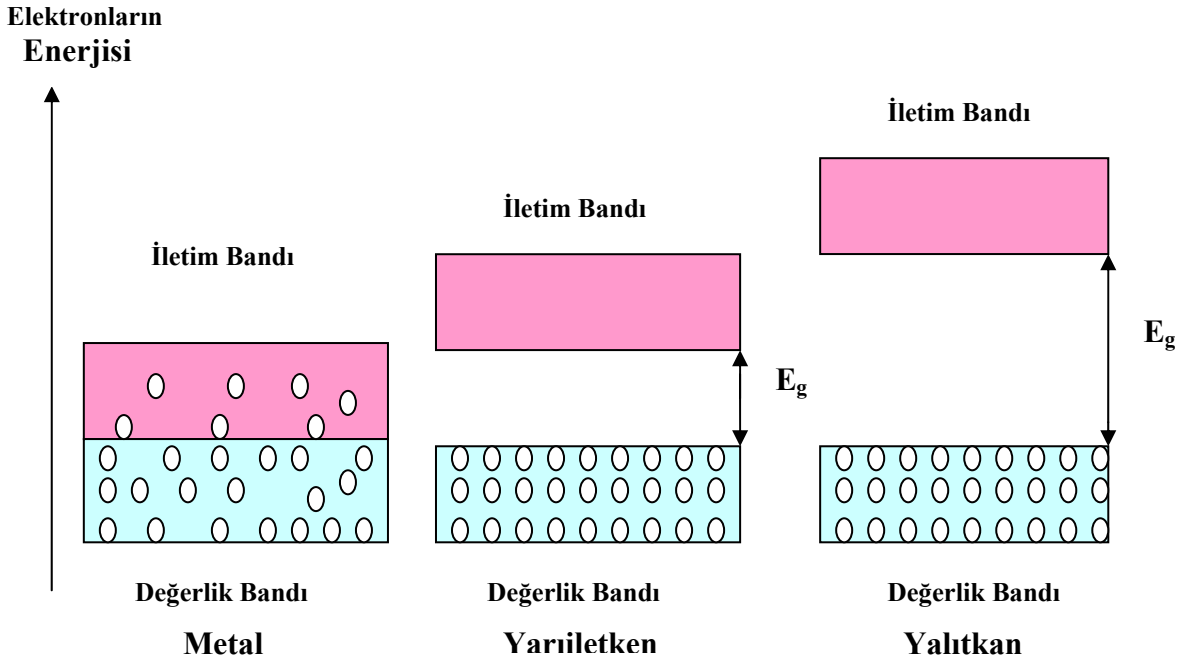
Yüklü parçacıkların hareketlerine, silindirik kuantum kuyusundan oluşan kuşatmanın yanı sıra silindir eksenini doğrultusunda da bir manyetik alan uygulanarak ek bir kısıtlama getirilirse çift parabolik kuşatma etkisi altında kalan parçacıklarda, manyetik alan şiddetine duyarlı lokalizasyonlar oluşabileceği öngörülmektedir. Bu ise teorik ve teknolojik anlamda incelenmesi gereken önemli bir problemdir.

Bu çalışmada amacımız, sistemin üzerine manyetik alan uygulanması ile sistemde oluşturulan parabolik kuşatmaya ek olarak ayrıca uzaysal kuşatmanın da parabolik seçilerek ikincil bir parabolik kuşatma etkisi yaratmak ve oluşan sistemin simetrisini hiç bozmadan sadece iki parabolik potansiyel arasında oluşan (step) yükseklik farkından yararlanarak, elektronları, iki parabolün üst üste geldiği (overlapped) yerde oluşan cepte lokalize etmek ve bu yapının enerji düzeylerini hesaplamaktır.

2. KATILARDA BANT YAPILARI

Her madde elektronlar içerir. Elektrik iletkenliği açısından önemli olan uygulanan elektrik alanda elektronun nasıl davrandığıdır[1]. Bilindiği gibi kristaldeki elektronlar, elektron yörüngelerinin bulunmadığı yasak enerji bölgeleri ile ayrılmış enerji bantları içinde yer alırlar. Enerji aralıkları veya bant aralıkları denilen bu yasak bölgeler, iletkenlik elektron dalgalarının kristal iyonları ile etkileşimi sonucu oluşur[1]. Her katının karakteristik bir enerji bant yapısı vardır. Katılardaki bant yapılarının çeşitliliği elektrik iletiminde belirleyici özelliktir. Aşağıda Şekil-2.1’de metal, yarıiletken ve yalıtkanlar için 0 °K sıcaklıkta tipik bant yapıları verilmiştir.

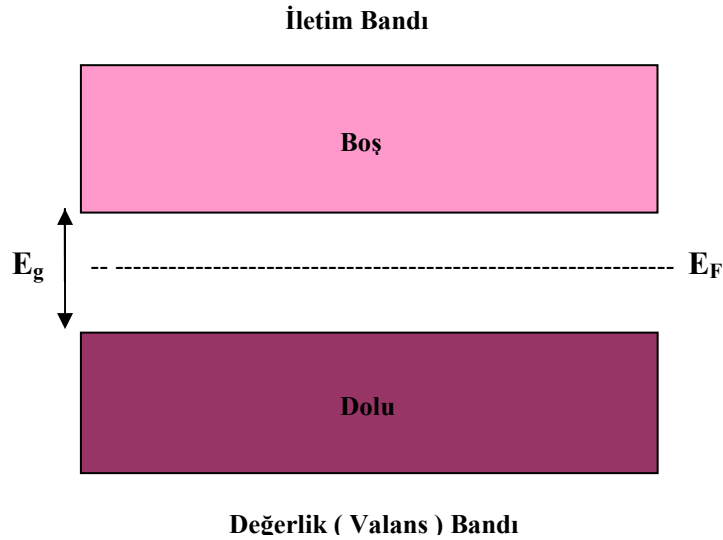
Metallerde enerji bantları kısmen dolu veya boş kısımlardan oluşur. Yalıtkanlarda ise tüm enerji bantları tamamen dolu veya tamamen boştur. Yalıtkanların yasak enerji aralığı (E_g) değeri de büyüktür. Bu nedenle iki yalıtkan maddenin ardışık olarak birleştirilmesiyle yasak enerji bant aralığı daha da büyür. Yarıiletken materyallerde ise bantların birkaç tanesi çok az miktar dolu ya da boş iken, diğer bütün bantlar tamamen dolu veya boş olacak şekildedir.



Şekil-2.1 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda $T = 0$ °K için tipik bant yapıları.

3. YARIİLETKENLER

Yarıiletkenler katıların en önemli ve ilginç sınıfını oluştururlar. Bunlar iletkenlikleri metaller ve yalıtkanlar arasında olan, sıcaklığın artmasıyla iletkenlikleri artan maddelerdir. Yarıiletkenler oda sıcaklığında 10^{-2} den 10^9 ohmcm'ye kadar ve sıcaklıkla hızla değişen elektrik özdirenciyle sınıflandırılır. Bir yarıiletkenin elektriksel iletkenliği sıcaklıkla orantılıdır. Sıcaklık arttığında yarıiletkenin özdirencinin küçülmesi onun önemli bir özelliğidir. Diğer önemli bir özellikleri ise katkılama yoluyla iletkenliklerinin artmasıdır. Yarıiletkende uygun yabancı madde konsantrasyonunun artmasına bağlı olarak özdirenç küçülür[2]. Yarıiletkenlerin bant yapıları elektrik iletiminde belirleyici özellik gösterir. Şekil-3.1'de tipik bir yarıiletkenin bant yapısı gösterilmektedir. Bant diyagramlarında dolu olan banda değerlik (valans) bandı, boş olan banda ise iletim bandı denir. $T = 0$ °K sıcaklıkta iletim bandı tamamen boş iken değerlik (valans) bandı tamamen doludur. Bu yüzden yarıiletkenler düşük sıcaklıklarda yalıtkanlardır. $T = 0$ °K sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin E_F Fermi enerjisi yasak enerji aralığının tam ortasındadır.



Şekil-3.1 $T = 0$ °K sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin bant yapısı

Yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı genellikle 3 eV'dan küçüktür. Yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı yalıtkanların yasak enerji aralığından (7-10 eV) daha küçük değere sahip olduğundan sıcaklık artırılırsa ($T > 0$ °K) elektronlar yasak enerji aralığını geçecek

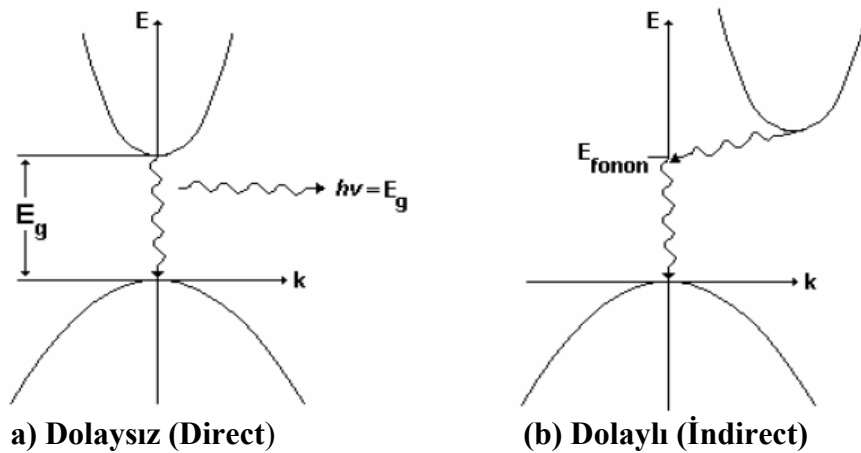
kadar uyarılır ve değerlik (valans) bandında bir boşluk bırakarak iletim bandına geçerler. Bu sebepten yüksek sıcaklıklarda yarıiletkenler iletkenler gibi davranırlar. Boşluklar (holler) ise pozitif yüklü tanecikler gibi davranırlar ve elektronun yükü ile zıt yüke sahiptirler. Boşlukların ve elektronların her ikisi de elektrik alandan etkilendiği için ilettime katkı sağlarlar. Saf bir yarıiletkende ilettime katılan elektron ve hollerin sayısı aynıdır[2].

3.1. YARIİLETKEN MADDELERDE DOLAYLI VE DOLAYSIZ BANT GEÇİŞLERİ

E_g yasak enerji aralıklı maddeye $E = \frac{hc}{\lambda} \geq E_g$ enerjili bir ışık düşürülürse

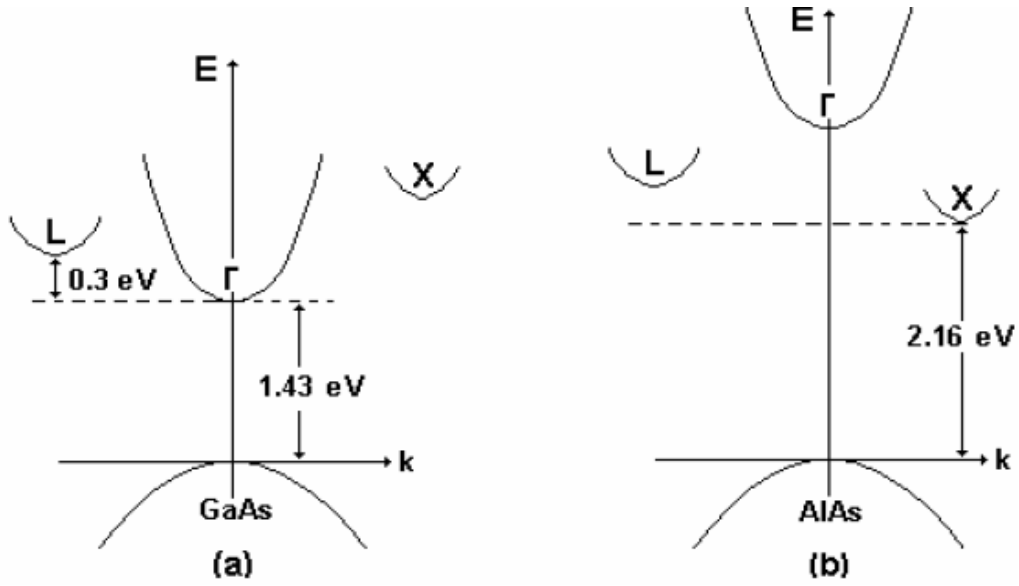
değerlik bandındaki elektronlar foton enerjisini soğurarak iletkenlik bandına geçerler. Burada çok kısa bir süre kalırlar. Elektronlar E_g enerjili bir foton yayarak tekrar değerlik bandına dönerler. Dolaysız (direct) bir optik geçişte iletim bandının minimumu ile değerlik bandının maksimumu aynı k değerine sahiptir ($k=0$). Dolaysız bir optik geçiş, k değerinde önemli bir değişikliğe yol açmaz, çünkü soğurulan fotonun dalga vektörü küçüktür.

Silikon gibi bazı yarıiletken maddelerde iletim bandının en alt noktası ile değerlik bandının tepesi aynı k değerine sahip değildir. Bu yüzden bu tür geçişlerde momentum korunabilmesi için fonon momentumuna ihtiyaç vardır. Bu özelliği taşıyan yarıiletken maddelere dolaylı (indirect) yarıiletkenler denir.



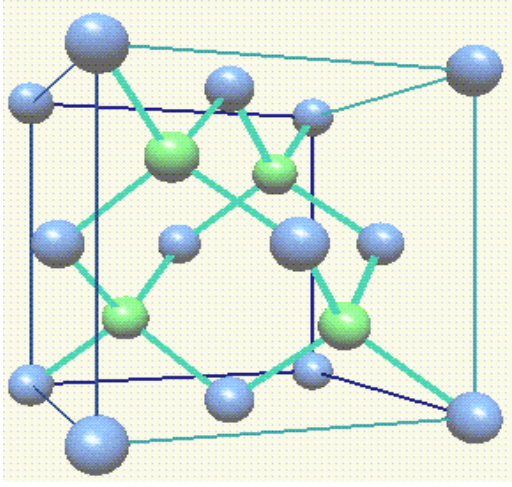
Şekil-3.2 a) Dolaysız materyallerde geçişlerin gösterimi, b) Dolaylı materyallerde geçişlerin gösterimi.

Aşağıda Şekil-3.3’de verildiği gibi dolaysız ve dolaylı geçişli maddelerde Γ , X ve L gibi yüksek simetri noktaları bulunur. Bu noktalar Brillouin bölgesinin merkezinde ve sınırında yer alır. İletim bandının minimumuna ($k=0$ durumunda) Γ denir. Değerlik bandı ile iletim bandı arasındaki geçişler sırasında geçiş iletim bandının Γ vadisi ile değerlik bandı arasında oluyorsa yapı dolaysız geçiş özelliği gösterir. Geçiş, iletim bandının L ve X vadisi ile değerlik bandı arasında oluyorsa dolaylı geçiş özelliği gösterir.

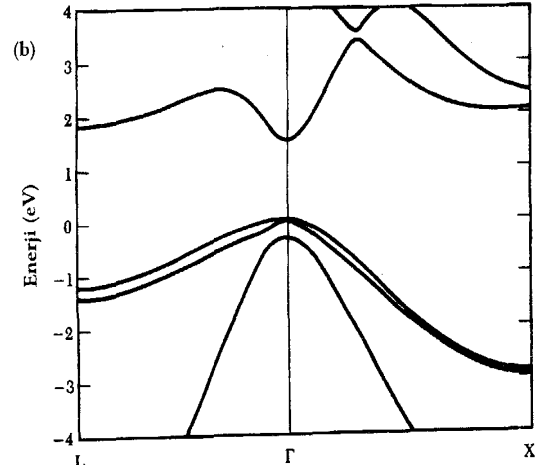


Şekil-3.3.a) GaAs’ da L, X, Γ ile verilen süreksizliklerinin şematik gösterimi, b) AlAs’da L, X, Γ , ile verilen süreksizliklerinin şematik gösterimi.

GaAs oda sıcaklığında dolaysız (direct) bant aralığına sahip bir malzeme özelliği gösterir[3]. İletim bandı minimumuna ($k=0$ durumu) Γ denir. İletim bandının daha yukarısındaki iki vadinin minimumlarına ise, dolaylı vadilerden daha düşük durumdaki minimuma L, dolaylı vadilerden daha yüksek durumdaki minimuma X adı verilir. (Şekil-3.3a)



(a) GaAs Kristali



(b) GaAs Kristalinin Bant Yapısı

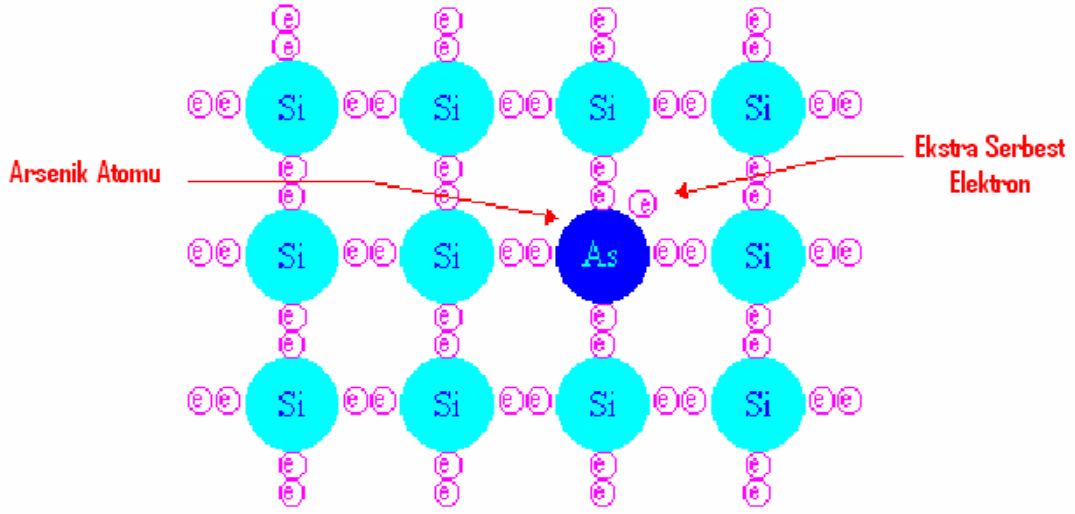
Şekil-3.4.a) GaAs Kristali, b) GaAs Kristalinin Bant yapısı

AlAs'ın dolaysız olan Γ minimumu, dolaylı olan X minimumundan çok daha yukarıdadır. Bu nedenle AlAs oda sıcaklığında dolaylı geçişli bir malzemedir (Şekil-3.3b).

3.2. KATKILI YARIİLETKENLER

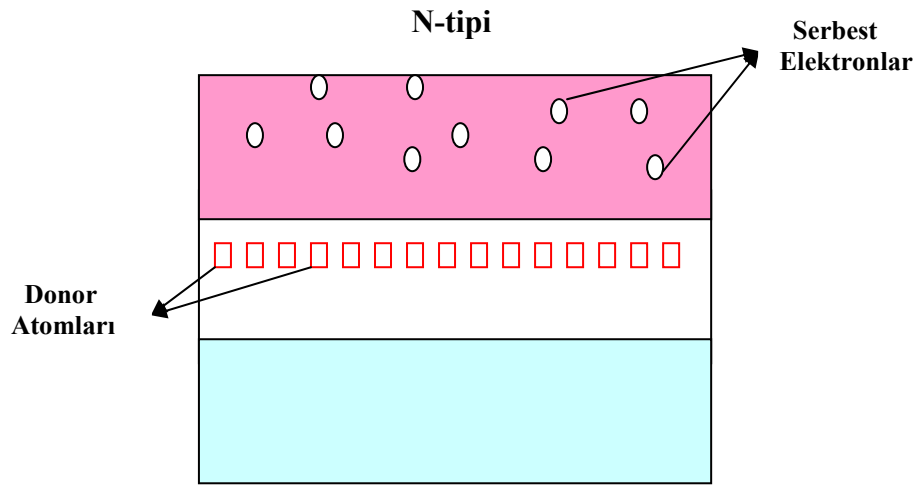
Öz taşıyıcı sayısı (intrinsic carrier) fazla olmadığından yarıiletkenlerde taşıyıcı sayısını artırmak için yarıiletkene katkı maddesi eklenir. Bazı katkı maddeleri ve örgü bozuklukları bir yarıiletkenin elektrik özelliklerini çok şiddetli etkiler. Silisyum içine $1/10^5$ oranında Bor katıldığı zaman saf Silisyumun oda sıcaklığındaki elektrik iletkenliği 10^3 misli artar[1]. Bileşik yarıiletkende bileşiklerden birinin atom eksikliği de katkı maddesi gibi davranır; bunlara kusurlu yarıiletken denir. Bir yarıiletkene katkı atomları ekleme işine de aşılama (doping) adı verilir[1].

Yarıiletken maddelerde elektron ve holler olmak üzere iki tip yük taşıyıcıları bulunur. Saf yarıiletkene katılan safsızlık atomları yarıiletkenin taşıyıcı sayısını artırarak elektriksel özelliğini büyük ölçüde değiştirir[4]. Si ve Ge gibi valansı dört olan yarıiletken maddelerin içerisine Şekil-3.5'de gösterildiği gibi valansı beş olan As atomları katılırsa, Si atomunun dört elektronu As atomunun dört elektronu ile kova-



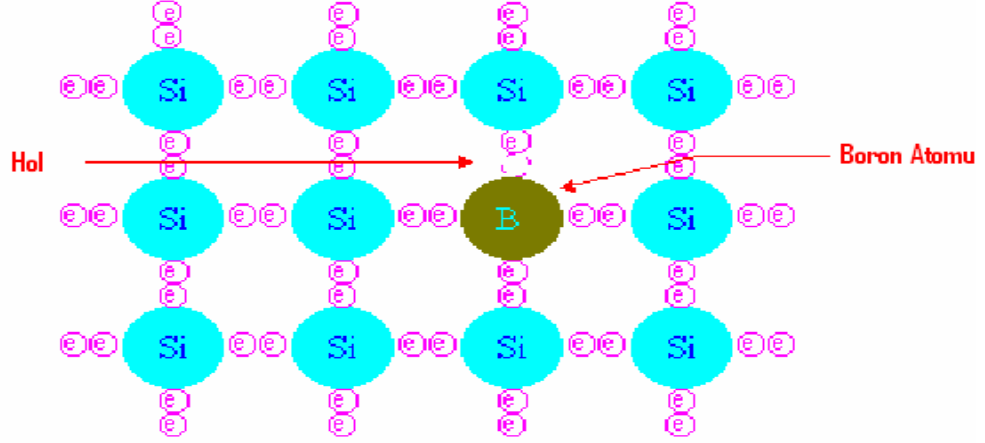
Şekil-3.5 As katkılanmış Si kristali

lent bağ oluşturur. Ancak As atomu beş elektronlu olduğu için bağlanmalar sonucunda As atomunun bir elektronu boşta kalır ve bağa katılmaz. Bu elektron katkı iyonu çevresinde $-\frac{e^2}{r}$ Coulomb potansiyeli etkisinde hareket eder. Fakat Coulomb etkileşmesi oldukça zayıftır ve parçacık serbest elektron gibi davranır. Bir elektronu boşta kalan ve elektron verebilen bu tür katkı atomlarına verici (donor) safsızlık atomu denir. Bu safsızlık atomları yasak enerji aralığında iletim bandına yakın bir yerde bir enerji düzeyi oluşturur(Şekil3.6).



Şekil-3.6 As katkılanmış Si kristalinin enerji bant diyagramı

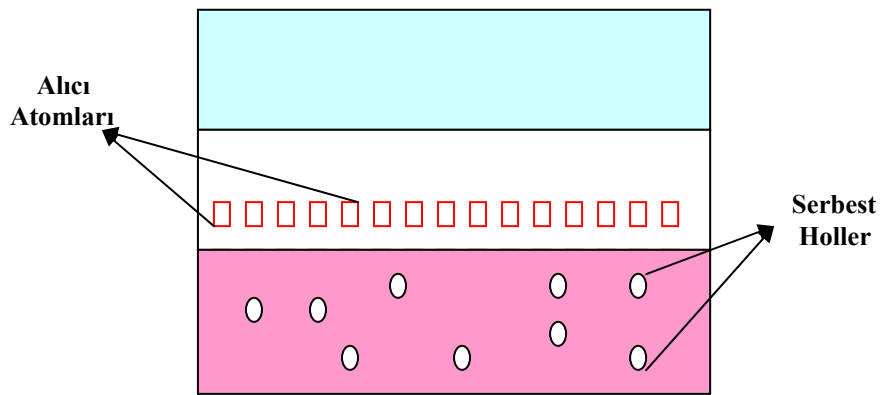
Si ve Ge gibi yarıiletkenler içerisinde Şekil-3.7’ deki gibi valansı üç olan B katkılanırsa Si atomunun üç atomu ile B atomunun üç elektronu yine kovalent bağ yapar ve atomlar arasında oluşan bağlanmalar sırasında B’un bir atomunda elektron eksik kalır.



Şekil-3.7 B katkılanmış Si kristali

Eksik kalan bu elektron başka bir atomdan alınan elektron ile tamamlanır. Bu elektronun bıraktığı yerde artı yüklü bir hol oluşur. Bu hol safsızlık atomu çevresinde - $\frac{e^2}{r}$ Coulomb potansiyeli etkisinde hareket eder. Fakat Coulomb etkileşme terimi zayıf olduğu için serbest parçacık gibi davranır. Bir elektron alan atoma alıcı (acceptor) safsızlık atomu denir. Bu safsızlık atomları Şekil-3.8’deki gibi yasak enerji aralığında valans bandına yakın bir yerde bir enerji düzevi oluşturur.

P-tipi



Şekil-3.8 B katkılanmış Si kristalinin enerji bant diyagramı

Enerji bant diyagramlarından görüldüğü gibi, bir elektron enerji aldığı anda

bandın üst tarafına çıkar, boşluk ise enerji aldığıında aşağı iner.

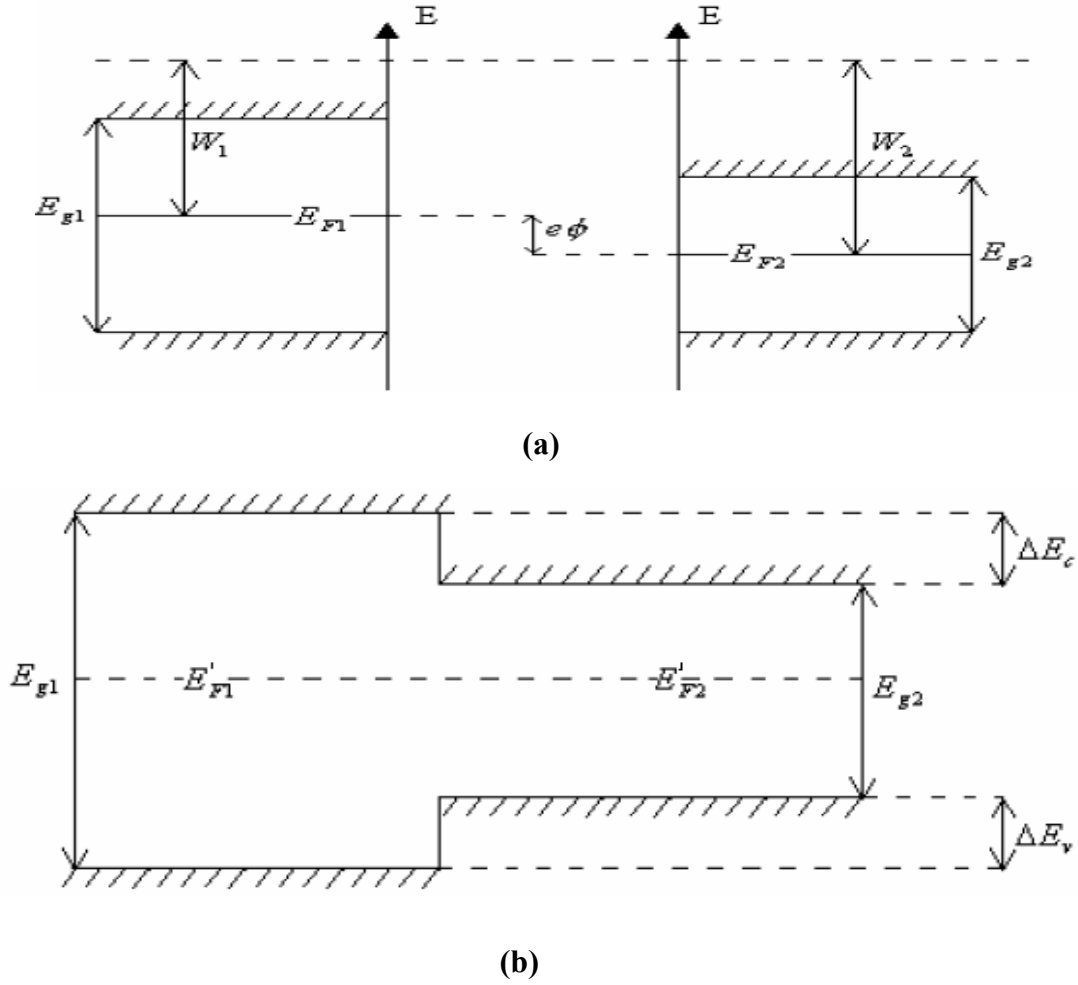
Verici atom sayısı alıcılardan daha fazla ise, vericilerin ısısal iyonlaşması iletkenlik bandına elektronlar aktarır. Bu durumda kristalin iletkenliği elektronlar (negatif yükler) tarafından belirlenir ve bu maddeye n tipi yarıiletken denir[1].

Alıcı sayısı daha fazla olduğunda valans bandına boşluklar aktarılır ve iletkenlik boşluklar tarafından belirlendiği için bu maddeye p tipi yarıiletken denir[1].

4. HETEROYAPILAR

İki veya daha fazla benzer yapıdaki yarıiletken kristal bir araya getirildiği zaman oluşan yapıya heteroyapı denir. Heteroyapıyı oluşturan yarıiletkenlerin elektronik yapısı ve kristal potansiyellerinin ara yüzeyde değişmediği kabul edilir. Bir araya getirilen heteroyapıların örgü sabiti ve örgü yapısı birbirine yakın olmalıdır. Bu koşulla elektronun dalga fonksiyonunun ara yüzeyde değişmediği yani \vec{k} dalga vektörünün ara yüzeyde değişmediği kabul edilir. Örgü sabiti heteroyapıyı oluştururken yarıiletkenlerin uygunluğunun bir ölçüsüdür. Kullanılan yarıiletken materyalin örgü sabiti bir yarıiletkenin heteroyapı oluşturabilme yetkinliğini belirler. Örneğin AlAs ve GaAs materyallerinin örgü sabitleri arasındaki fark 0.01\AA 'dır[5]. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ alaşım sistemi $0 \leq x \leq 1$ için GaAs ile hemen hemen mükemmel bir eşleşme sağladığından bu yapı önemli bir heteroyapı sistemi oluşturur[5].

Yapıyı oluşturan yarıiletkenlerin elektron yük yoğunluğu ara yüzeyin her iki yanında aynı olmalıdır. Fermi enerjisi elektronun yük yoğunluğuna bağlıdır. $T = 0 \text{ }^\circ\text{K}$ sıcaklıkta yarıiletkenlerde Fermi enerjisi yasak enerji aralığının hemen ortasında yer alır. Örgü sabitleri arasındaki farktan dolayı elektron yoğunluğunda ortaya çıkan farklar yüzeyde yük akışına sebep olur. Bu yük akışının miktarı önemsenmeyecek kadar azdır ve bu yük tabakası ihmal edilebilir. Şekil-4.1 (a)'da farklı yasak enerji aralığına sahip yarıiletkenler bir araya getirilerek oluşturulan heteroyapılar gösteriliyor.



Şekil-4.1. a) Birbirine eklenmiş farklı iki yarıiletkenin bant diyagramı, b) Farklı iki yarıiletkenin birleştirilmesiyle oluşan heteroyapıdaki bant süreksizlikleri. ΔE_c iletkenlik, ΔE_v valans bandında oluşan süreksizlikleri

Geniş bant aralıklı p-tipi bir malzeme ile dar bant aralıklı n-tipi bir malzeme birleştirilirse böyle bir yapının bant diyagramı çizilirken yalnızca bant süreksizliklerinin değeri değil, bant bükülmeleri de hesaba katılmalıdır.

Heteroyapıyı oluşturan yarıiletkenlerin örgü sabitleri aynı veya çok yakın değerlerde iseler bir süre sonra yarıiletkenlerin Fermi enerji düzeyleri Şekil-4.1 (b)'de görüldüğü gibi aynı seviyeye gelir. Bunun sonucunda değerlik (valans) bandında meydana gelen kesiklik aşağıdaki gibi verilir.

$$\Delta E_v = \frac{E_{g1} - E_{g2}}{2} \quad (4.1)$$

Aşağıdaki çizelgede birkaç önemli heteroyapı için yasak enerji aralıkları ve değerlik (valans) bant süreksizlikleri verilmiştir.

Çizelge-1:Bazı önemli A-B yarıiletken heteroyapıların bant boşluğu enerjileri ve valans bant süreksizlikleri. Eğer A yarıiletkeninin valans bant zirvesi B yarıiletkeninkinden yüksekse, değerlik (valans) bant süreksizliği ΔE_v pozitifdir[7].

Heteroyapı A-B	E_g (A) (eV)	E_g (B) (eV)	ΔE_v (eV)
Ge-GaAs	0.67	1.42	+0.25 den +0.65
Si-GaP	1.12	2.25	0.8
AlAs-GaAs	2.15	1.42	-0.40
Ge-AlAs	0.67	2.15	0.92
Si-ZnSe	1.12	2.70	1.25
GaAs-ZnSe	1.42	2.70	+0.96 dan +1.10
Si-Ge	1.12	0.67	-0.16 dan -0.40

İletim bandı birkaç minimuma sahip karmaşık bir yapıdır. Valans bandı ΔE_v bilirse iletim bandı ΔE_c aşağıdaki gibi verilir.

$$\Delta E_c = \left| \Delta E_{g1}^p - \Delta E_{g2}^p \right| - \left| \Delta E_v \right| \quad (4.2)$$

ΔE_{g1}^p , ΔE_{g2}^p külçe yarıiletkenlerin yasak enerji aralıklarıdır. Kullanılan yarıiletken direkt bant geçişli ise ΔE_c kolayca bulunur. Ama yarıiletkenler dolaylı (indirect) bant geçişli ise iletim bandındaki kesiklilik hesaplanırken aynı iletim bandı minimumları alınmalıdır. Yani külçe bant diyagramında k değerleri aynı olmalıdır.

ΔE_c ve ΔE_v ' nin toplamı heteroyapıyı oluşturan yarıiletkenlerin enerji aralıkları arasındaki farka eşit olmak zorundadır. $x = 1$ değeri için yasak enerji aralıkları arasındaki farkın % 70' i iletkenlik, % 30' u ise değerlik (valans) bandından kaynaklanmaktadır. x değerine bağlı olarak bu oranlarda değişir. Örneğin $x = 0.45$ değeri için farkın % 60' ı iletkenlik, % 40' ı değerlik (valans) bandından kaynaklanır[2].

5. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER VE ÖNEMİ

Yarıiletkenlerin bir "alt taş (substrate)" üzerinde atomik tabakalar kalınlığında epitaksiyel olarak büyütülmesi ile oluşturulan yapılar, düşük boyutlu sistemler (nano-yapılar) olarak adlandırılırlar. Bu yapılar günümüzde çeşitli kristal büyütme yöntemleriyle yapılabilmektedir. MBE (Molecular Beam Epitaxy) ve MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) büyütme teknikleri ile yasak bant aralığı küçük olan bir malzemenin etrafı, bant aralığı daha büyük bir malzemeyle kaplanıp büyütme yapılabilir. Böylelikle bir kuantum kuyusu, eğer bu yapının tersi yapılacak olursa bir kuantum bariyeri elde edilmiş olur. Buna iyi bir örnek örgü sabitleri birbirine çok yakın olan III-V bileşiklerinden GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısıdır.

Düşük boyutlu sistemlerde, örgü sabiti birbirine yakın farklı türde yarıiletkenler bir araya getirilerek yük taşıyıcılarının hareketleri uzamsal olarak sınırlandırılır. Bu sınırlamalar sonucu külçe materyalin sürekli enerji durumları yerine kuantum etkileri sonucu kesikli enerji değerleri elde edilir.

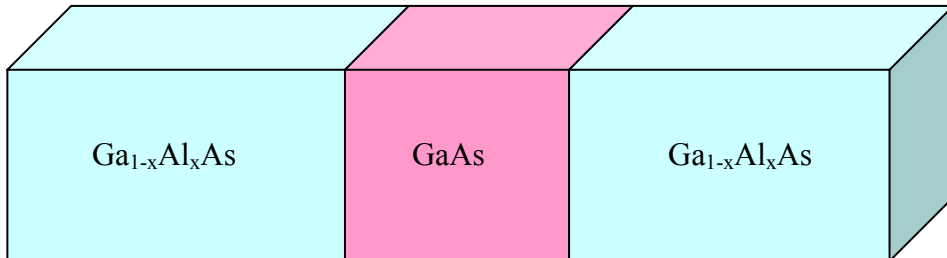
Üç boyutlu yapılarda yük taşıyıcı yoğunluğunu arttırabilmek için; sıcaklık arttırılabilir, katıya ışık gönderilebilir veya yabancı atomlarla katkılama yapılabilir. Fakat bu yöntemlerin önemli dezavantajları vardır. Ancak yarıiletkenlerde, yük taşıyıcılarının hareket ettiği boyut azaltılırsa yük taşıyıcıları ve dengeleme yükü uzayın farklı bölgesinde lokalize olacağından yukarıdaki sorunlar çıkmaz. Ayrıca düşük boyutlu sistemlerde taşıyıcıların yaşam süresi ve yoğunluklarını değiştirmek daha kolaydır. Düşük boyutlu sistemlerde boyut azaldıkça taşıyıcıların yaşam süreleri artar. Bunun nedeni saçılmaların azalmasıdır. Üç boyutlu sistemlerde fonon saçılmaları enerji kaybının temel nedenidir. Durum yoğunluğu fonksiyonu sürekli olduğu için $\hbar\omega_0$ ' dan yüksek enerjili elektronlar saçılmaya uğrarlar. Taşıyıcıların yaşam süresi 1-2ps kadardır. İki ve üç boyutlu yapılar arasındaki temel fark durum yoğunlukları arasındaki farktır. Boyut azaldıkça taşıyıcıların saçılmaya uğrama olasılıkları azalır ve bunun sonucunda taşıyıcıların yaşam süreleri artar. İki boyutlu yapılardaki taşıyıcıların yaşam süresi 10 ps civarındadır. Bir boyutlu yapılardaki taşıyıcıların yaşam süresi ise 100 ps civarındadır. Yük taşıyıcı yoğunluğu arttıkça yaşam süresi artar. Çünkü taşıyıcı konsantrasyonu arttıkça saçılma potansiyeline karşı perdeleme etkisi gösterir. Düşük boyutlu

sistemlerde parçacığın bulunduğu kuantum çukurundan tünelleme süresi yaşam süresine göre daha uzun olduğu için tünelleme olayı ihmal edilebilir.

Düşük boyutlu sistemlerin önemi sistemin fiziksel parametrelerinin ayarlanabilir olmasıdır. Örneğin, iki boyutlu sistemlerde optik özellikler kuşatılmış durumlara duyarlı bir biçimde bağlıdır. Sözü edilen bu durumlar ise, kuantum kuyusunun ayarlanabilir parametreleri olan kuyu genişliği ve engel yüksekliğinin değiştirilmesi ile istenildiği biçimde elde edilirler. Heteroyapılarda yasak bant genişliği de ayarlanabilir olduğu için, sonuçta bu sistemlerde optiksel özelliklerin değiştirilmesi mümkündür. İki boyutlu sistemlerde kuantum kuyusunun fiziksel parametreleri değiştirilerek, sistemin optik özellikleri istenilen biçimde ayarlanabilir. Aynı şekilde bir boyutlu sistemlerde kuantum telinin ayarlanabilir fiziksel parametreleri kullanılarak, sistemin optik özellikleri daha hassas bir biçimde ayarlanabilir. Çünkü kuantum tellerinde sistemin kuşatma boyutu arttırıldığından ayarlanabilir parametrelerin sayısı daha fazladır. Ayarlanabilir parametrelerin artması da optik özelliklerin daha hassas bir biçimde ayarlanabilmesi anlamına gelir.

5.1. KUANTUM KUYULARI, KUANTUM TELLERİ VE KUANTUM NOKTALARI

Heteroyapılar kuşatma boyutuna göre; kuantum kuyusu, kuantum teli ve kuantum noktası olarak isimlendirilirler. Bu sistemlerin en basiti örgü sabitleri birbirine çok yakın değerde olan ince bir GaAs tabakasının iki tarafına daha kalın $Ga_{1-x}Al_xAs$ eklenerek oluşturulan heteroyapıdır. (Şekil5.1).



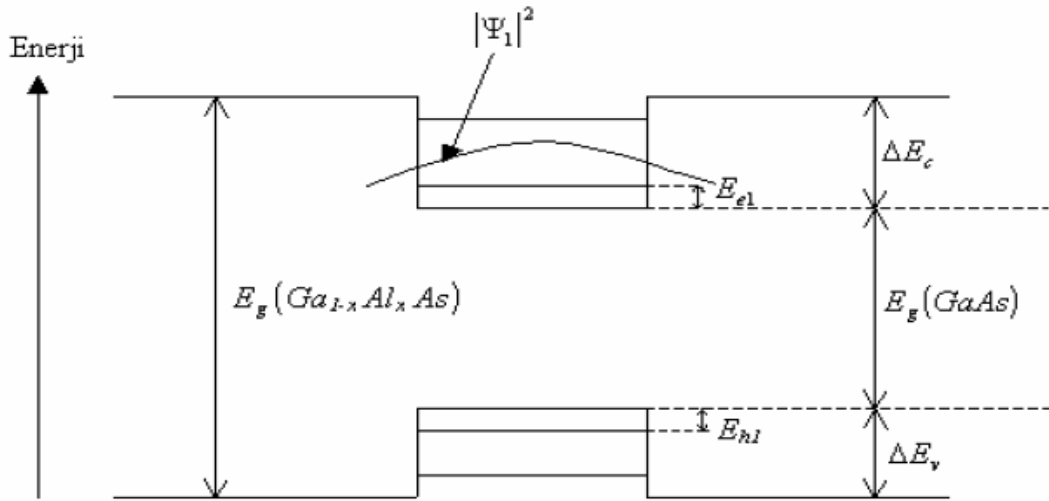
Şekil- 5.1. GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs eklemi örneği

Şekil-5.1'deki gibi bu malzemeler birleştirildiğinde, iletkenlik ve valans bantlarında Şekil-5.2'de gösterildiği gibi süreksizlikler oluşur ve bunun sonucunda

taşıyıcılar büyütme doğrultusundaki GaAs katmanında kuşatılmış olurlar. Taşıyıcılar diğer iki boyutta serbestçe hareket edip, büyütme doğrultusunda kuşatıldıkları için yapı artık iki-boyutlu hale gelmiştir ve bu nedenle “Kuantum Kuyusu” ile temsil edilebilir. Şekil- 5.2’ deki yapıda kuantum etkileri yapının özelliklerini önemli ölçüde değiştirebilir. Mesela GaAs katmanında oluşan kuantum kuyusunun soğurma eşik enerjisi GaAs külçesinin eşik enerjisinden büyüktür.

$$E_g(2D)=E_g(\text{GaAs})+E_{el}+E_{hl}$$

Burada E_{el} ve E_{hl} elektron ve hole’ ün taban durum enerjileridir. İncelenen yapıda Al konsantrasyonu 0.45’ den küçük alınırsa alaşımın direkt geçişlilik özelliği korunur[8]. GaAs tabakasının kalınlığının 20\AA° - 400\AA° arasında olması sağlanırsa (GaAs içinde elektronun ortalama serbest yolundan küçük, GaAs kristalinin makroskobik özelliklerini gösterecek kadar büyük) GaAs katmanı külçe özelliklerini gösterir ve elektron bir çarpışma yapmadan kuyunun bir ucundan diğer ucuna gidebilir.



Şekil- 5.2. GaAs kuantum kuyusunun elektronik yapısı. $E_g(\text{GaAs})$ külçe GaAs’ın yasak band aralığıdır. İletkenlik bandında kuşatılmış en düşük enerjili seviye E_{el} ’dir ve külçe GaAs’ın iletkenlik bant sınırından daha yukarıdır.

Kuantum kuyusunda bulunan elektronun enerjisi,

$$E_e = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (5.1)$$

eşitliği ile verilir. Burada, m^* GaAs' in en düşük iletkenlik bandındaki elektronun külçe etkin kütlesi, E_c iletkenlik bandı sınırındaki enerji değeridir. k ise E_c iletkenlik bandı sınırında sıfır değerini alan dalga vektörüdür.

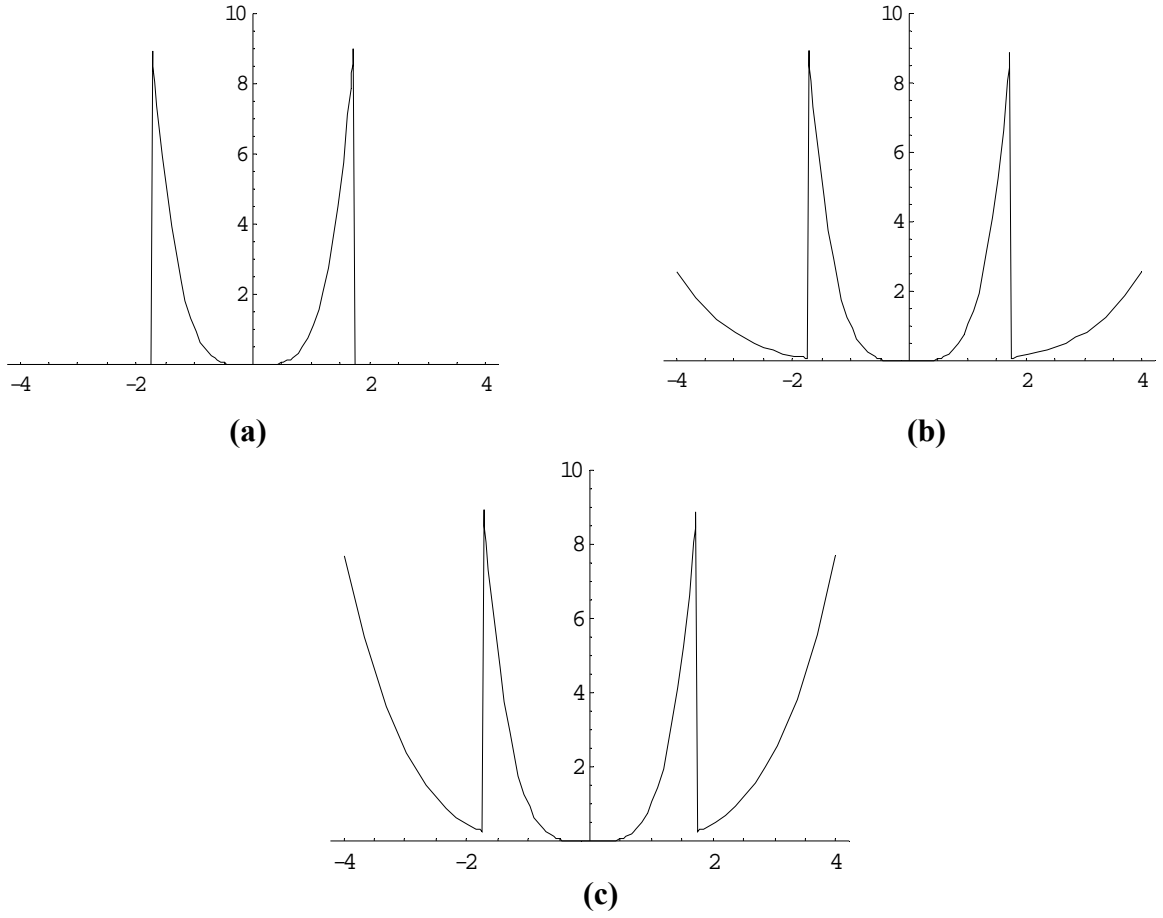
Bu durumda bir boyutlu parçacık problemine ulaşılmış olur. Aradaki tek fark elektronun etkin kütlesidir. Bu da elektronun serbest uzayda değil de GaAs' in içinde hareket ediyor olmasından kaynaklanır. Etkin kütle nin büyüklüğü kristal potansiyelinin şiddetini yansıtır ve bu değer maddeden maddeye değişir. GaAs için elektronun etkin kütle değeri, m_0 serbest elektronun kütlesi olmak üzere $0.067m_0$, AlAs için ise $0.1m_0$ kadardır. Kuantum kuyusunun oluşmasını sağlayan iki yarıiletkenin bant yapıları birbirine çok benzer olduğu için GaAs ve $Ga_{1-x}Al_xAs$ arasındaki etkin kütle farkı ihmal edilebilir.

Kuşatmanın elektron üzerindeki etkisi sonucu ara yüzeye dik doğrultuda enerji spektrumu süreksizlik göstererek enerji seviyelere ayrılır. Taban durum enerji seviyesinin etkin kütle değerinin azalması ile kuyunun üst kısmına çıkması beklenir. Burada; engel yüksekliği, etkin kütle ve kuyu genişliği küçük de olsa yine de en az bir kuşatılmış (bağlı) durum elde edilir.

Toplam enerjiyi belirlemek için bir boyutlu kuşatılma için belirlenen enerjilerin eklenmesi uygundur. Örneğin verilen bir kuyu genişliği için bariyer yüksekliği E_c iken bir boyutlu durumda GaAs' in iletim bandının tabanından itibaren ölçülen taban durum enerjisi E_1 olsun, kuantum telinde iki boyutlu kuşatılmanın olduğu yapıda bu enerji değeri $2E_1$ dir. Bu demektir ki kuşatılma etkisi artırılırsa (yani elektron iki boyuttan bir boyutta hareket etmeye zorlanırsa) en düşük kuşatılmış durum, kuyunun tabanından itibaren yukarıya kaydırılmış olur. Bariyer yüksekliği boyuttan bağımsız olduğu için kuantum telindeki kuşatılmış bir durumun kuyu genişliğine duyarlılığı, kuantum kuyusundan iki kat fazladır.

6. ÇİFT PARABOLİK KUŞATMA ALTINDA KUANTUM SİSTEMİ ELEKTRONİK ENERJİ DÜZEYLERİ

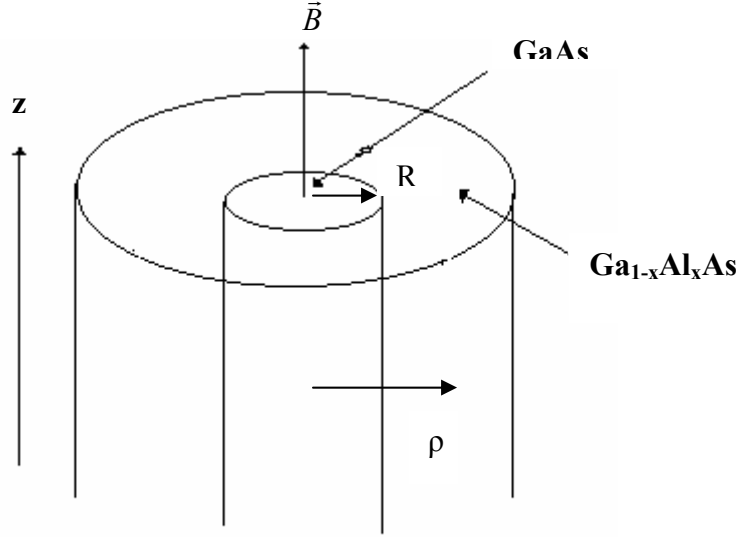
Bu çalışmada sistem üzerine manyetik alan uygulanması ile sistemde oluşan parabolik kuşatmaya (Şekil-6.1b) ek olarak ayrıca uzaysal kuşatmada (Şekil6.1a) parabolik seçilerek ikincil bir parabolik kuşatma etkisi yaratılmış ve oluşan sistemin simetrisini hiç bozmadan sadece iki parabolik potansiyel arasında oluşan (step) yükseklik farkından yararlanarak, elektronlar, iki parabolün üst üste geldiği (overlapped) yerde lokalize edilmiş ve bu yapının enerji düzeyleri hesaplanmıştır.



Şekil-6.1. a) Parabolik potansiyel, b) Manyetik alan etkisiyle parabolik potansiyel, c) Manyetik alanın büyük değerlerinde parabolik potansiyel

6.1. ENERJİ ÖZDEĞERİ VE DALGA FONKSİYONLARI

Çalışmanın bu kısmında $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ kuantum telinde tel eksenine paralel uygulanan manyetik alan için enerji düzeyleri bulunmuştur. Aşağıdaki şekilde silindirik



Şekil-6.2 Silindirik kuantum telinin şematik gösterimi

kuantum telinin şematik gösterimi verilmiştir.(Şekil-6.2).

Tel eksenine paralel uygulanan bir manyetik alan altında R yarıçaplı silindirik kuantum telindeki elektron için Hamiltonyen;

$$H = \frac{(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m^*} + V(\rho, \phi) \quad (6.1)$$

ile verilir. Burada \vec{P} elektronun momentumunu, e elektronun yükünü, m^* elektronun etkin kütlesini gösterir. \vec{A} ise $\vec{A} = \frac{(\vec{B} \times \vec{r})}{2}$ şeklinde seçilen vektör potansiyelidir.

Burada parabolik olarak seçilen skaler potansiyel $V(\rho, \phi)$ ise;

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} V_0 \left(\frac{\rho}{R} \right)^2, & \rho < R \\ 0 & , \rho > R \end{cases} \quad (6.2)$$

şeklinde tanımlanmıştır.

\vec{P} momentum operatörü ve \vec{A} vektör potansiyelinin değeri yerine yazılırsa sistemin Hamiltonyenini Ek A' da gösterildiği gibi;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} \rho^2 + V(\rho, \phi) \quad (6.3)$$

şeklinde elde ederiz. Burada L_z açısal momentum operatörünün z-bileşenidir ve $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ şeklinde tanımlanır.

Hamiltonyen silindirik koordinatlarda yazılırsa;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} \rho^2 + V(\rho, \phi) \quad (6.4)$$

olarak elde edilir. Enerji özdeğeri ve özfonksiyonları bulmak için;

$$H\Psi(\rho, \phi, z) = E\Psi(\rho, \phi, z) \quad (6.5)$$

özdeğer denklemi çözümlenmelidir.

Elektron z-yönünde serbest parçacık olduğundan dolayı z yönündeki çözüm için;

$$\Psi(z) = Ae^{ik_z z} \quad (6.6)$$

şeklinde serbest parçacık çözümü yazılabilir. Parçacık ϕ yönünde 2π periyoduna sahip olduğundan parçacığın ϕ yönündeki çözümü için;

$$\Psi(\phi) = Be^{im\phi}, \quad (m \text{ tamsayı}) \quad (6.7)$$

yazılabilir. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu;

$$\Psi(\rho, \phi, z) = Ne^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) \quad (6.8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $U(\rho)$ parçacığın ρ yönündeki çözümü, N ise normalizasyon sabitidir. Enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonlarını bulmak için (6.8) ifadesi Schrödinger denkleminde yerine yazılıp Ek C' de gösterilen düzenleme ve dönüşümler yapılarak;

$$\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dU(\rho)}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}U(\rho) - \omega^2\rho^2U(\rho) + \lambda U(\rho) = 0 \quad (6.9)$$

denklemini elde edilir. Denklemi boyutsuz hale getirmek için;

$\xi = \omega\rho^2$ dönüşümü yapılır ve Ek C' de gösterilen düzenlemeler sonucunda;

$$\xi \frac{d^2U(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dU(\xi)}{d\xi} + \left(-\frac{m^2}{4\xi} - \frac{\xi}{4} + \frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} \lambda_0 - \frac{m}{2} \lambda_0\right)U(\xi) = 0 \quad (6.10)$$

denklemini elde edilir. Bu denkleme asimtotik yaklaşım yöntemi uygulanarak çözüm elde edilebilir. Bu durumda bu denklemin $\xi \rightarrow 0$ ve $\xi \rightarrow \infty$ limit durumlarında asimptotik çözümlerine bakılmalıdır. Ek C kısmında bu çözümler incelenmiş ve (6.10) denkleminin çözümü;

$$U(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} (A \text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi] + B \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi]) \quad (6.11)$$

şeklinde elde edilmiştir. Bu durumda en genel dalga fonksiyonu;

$$\Psi(\xi, \phi, z) = e^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} (A \text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi] + B \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi]) \quad (6.12)$$

şeklinde verilir. Ancak $\xi \rightarrow 0$ durumunda $\text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi]$ fonksiyonu ıraksak olduğundan içerdeki dalga fonksiyonu;

$$\Psi_{i\phi}(\xi, \phi, z) = B e^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi] \quad (6.13)$$

olur. $\xi \rightarrow \infty$ durumunda $LaguerreL[a'_{|m|}, |m|, \xi]$ fonksiyonu ıraksak olduğundan dışarıdaki dalga fonksiyonu;

$$\Psi_{dis}(\xi, \phi, z) = A e^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} HypergeometricU[-a'_{|m|}, 1 + |m|, \xi] \quad (6.14)$$

şeklinde verilir.

Enerji ifadesi ise Ek C' de gösterildiği gibi;

$$E = \hbar\omega_c \left[\frac{m}{2} + \left(a'_{|m|} + \frac{|m|+1}{2} \right) \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2} \right)^{1/2} \right] \quad (6.15)$$

olur. Taban durumdaki enerjiler için $l=1$ ve $m=0$ olacağından enerji;

$$E = \hbar\omega_c \left[\left(a'_{01} + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2} \right)^{1/2} \right] \quad (6.16)$$

olarak bulunur. Burada $V_0 \rightarrow 0$ olduğu durumda, a'_{01} enerji özdeğerini terim belirleyen büyük yarıçap değerlerinde tamsayılara gideceğinden;

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c, \quad (n \text{ tamsayı}) \quad (6.17)$$

şeklinde bir çözüm elde edilir. Bu da manyetik alan etkisindeki bir parçacığın enerji düzeylerinin beklenildiği gibi Landau düzeyleri ile verildiğinin gösterimidir.

6.2. HESAPLAMALAR İÇİN KULLANILAN PARAMETRELER

Bu çalışmada GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum telinde enerji düzeyleri hesaplanırken elektronun kütlesi GaAs telindeki etkin kütlesi olan 0.067m₀ alınmıştır. Burada m₀ elektronun boş uzaydaki kütlesidir. GaAs ile Ga_{1-x}Al_xAs' ın bant yapıları birbirlerine çok yakın olduklarından her yerde GaAs'ın içindeki elektronunun etkin kütle değeri kullanılmıştır. Uzunluklar ise $a_B = \epsilon_0 \hbar^2 / m^* e^2$ şeklinde tanımlanan GaAs içindeki elektron için Bohr yarıçapı cinsinden tanımlanmıştır (ve GaAs içindeki değeri a_B = 98 Å' dur). Burada ϵ_0 ortamın dielektrik sabiti olup GaAs için 12.5' dir. Enerjiler ise $R_B = e^2 / 2\epsilon_0 a_B$ ile verilen GaAs için Rydberg sabiti cinsinden tanımlanmıştır (GaAs için Rydberg sabitinin değeri R_B = 5.8 meV' dir).

Kuantum telinde meydana gelen potansiyel bariyerinin yüksekliği Branis, Gang ve Bajaj' ın çalışmalarında verildiği gibi;

$$V_0 = Q_e (1.36x + 0.22x^2) eV \quad (6.18)$$

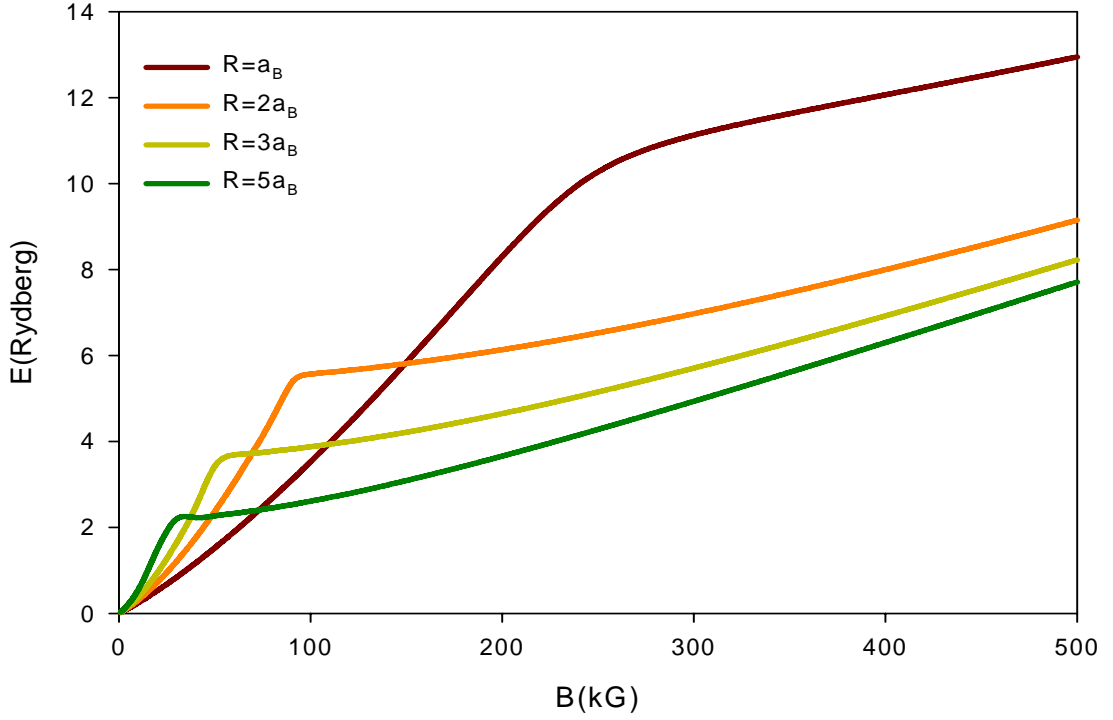
şeklinde dir[6]. Burada Q_e = 0.6' dır ve x Al konsantrasyonunu gösterir. x değerleri değiştirilerek farklı bariyer yükseklikleri elde edilebilir.

6.3. VERİLER VE YORUMLAR

Yapılan bu çalışmada çift parabolik kuşatma altındaki GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum telinde Al konsantrasyonu x = 0.2 ve x = 0.4 seçilerek öncelikle sabit yarıçap değerleri için manyetik alanla enerji değişimleri incelenmiş, daha sonra da bazı manyetik alan değerleri için ilk beş enerji düzeyi çizilmiştir. Al konsantrasyonunu x = 0.2 olduğu durumda potansiyel bariyerinin yüksekliği V₀ = 168.48 meV, x = 0.4 olduğu durumda ise V₀ = 347.52 meV' dur. Son olarak ise bazı manyetik alan değerlerinde dalga fonksiyonları çizilerek parçacığın lokalizasyonu incelenmiştir.

6.3.1 Al KONSTRASYONU $x = 0.2$ İKEN ELDE EDİLEN VERİLER VE YORUMLAR

Aşağıdaki Şekil 6.2' de $R=a_B$, $2a_B$, $3a_B$, $5a_B$ yarıçap değerleri için manyetik alanla enerji değişimleri incelenmiştir.



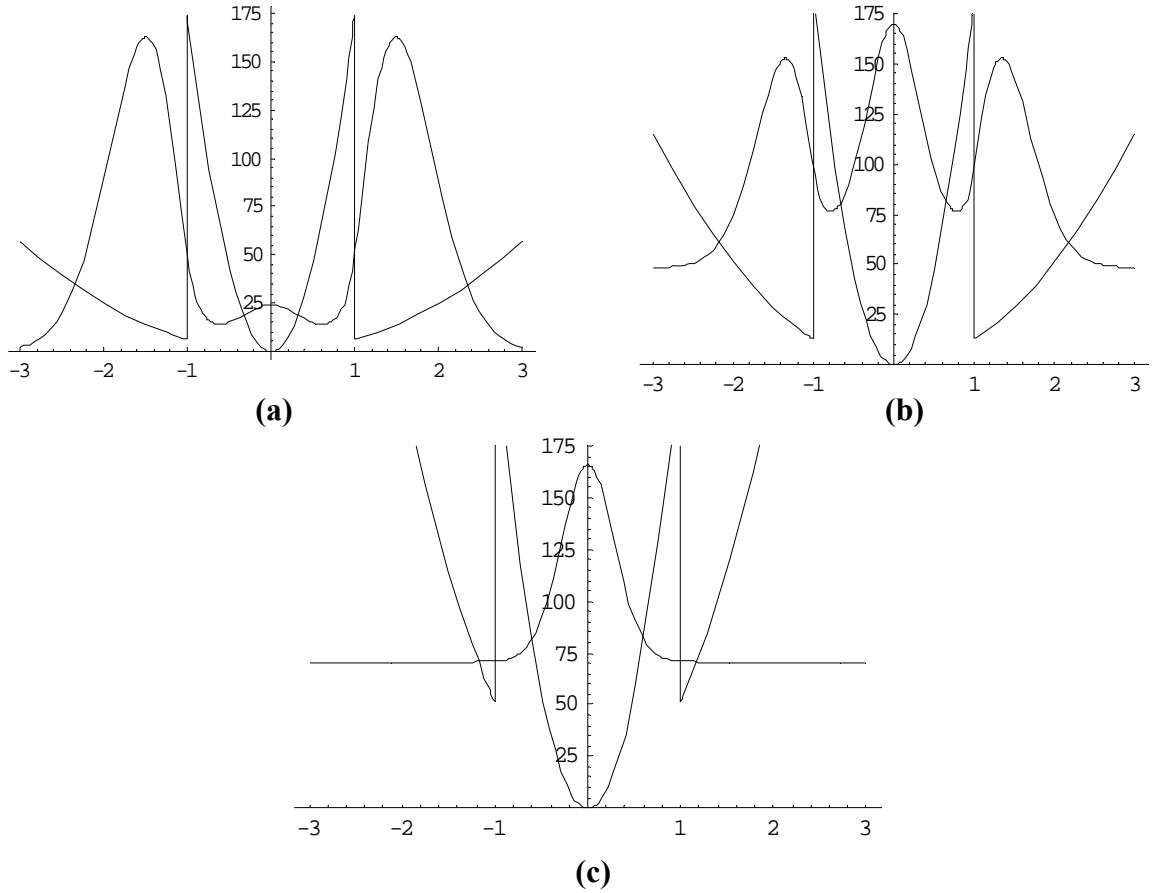
Şekil-6.3 Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için [GaAs için Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı 98 \AA°] çift parabolik kuşatma altında manyetik alanla enerji değişimi.

Grafikte bazı yarıçap değerleri için manyetik alana bağlı olarak enerji değişimleri verilmiştir. Grafikten de görüldüğü gibi belirli bir manyetik alan değerine kadar (örneğin $R = a_B$ için $B = 240 \text{ kG}$ ' a kadar) enerji daha hızlı artmakta, bu manyetik alan değerinden sonra ise daha yavaş artmaktadır. Enerjideki bu artışlar yaklaşık lineer sayılabilir. Elektronlar burada parabolik potansiyelden dolayı Landau enerji düzeylerine oturmuşlardır. Ancak grafikten de anlaşılacağı gibi iki parabolik kuşatmadan yalnızca birinin etkisini görmektedirler. Örneğin yarıçapın $R = a_B$ değeri için manyetik alanın yaklaşık 240 kG değerine kadar manyetik alan etkisinden kaynaklanan dış parabolün etkisindeyken, bu değerden sonra içteki parabole geçerek hem manyetik alanın hem de uzaysal kuşatmanın oluşturduğu diğer parabolün etkisine girmiştir.

Bu durumda elektronlar, manyetik alanın küçük değerlerinde manyetik alandan

kaynaklanan parabolik potansiyelin etkisindeyken, manyetik alanın artmasıyla manyetik alan ve uzaysal kuşatmadan kaynaklanan parabolik potansiyelin etkisinde olduğunu söyleyebiliriz.

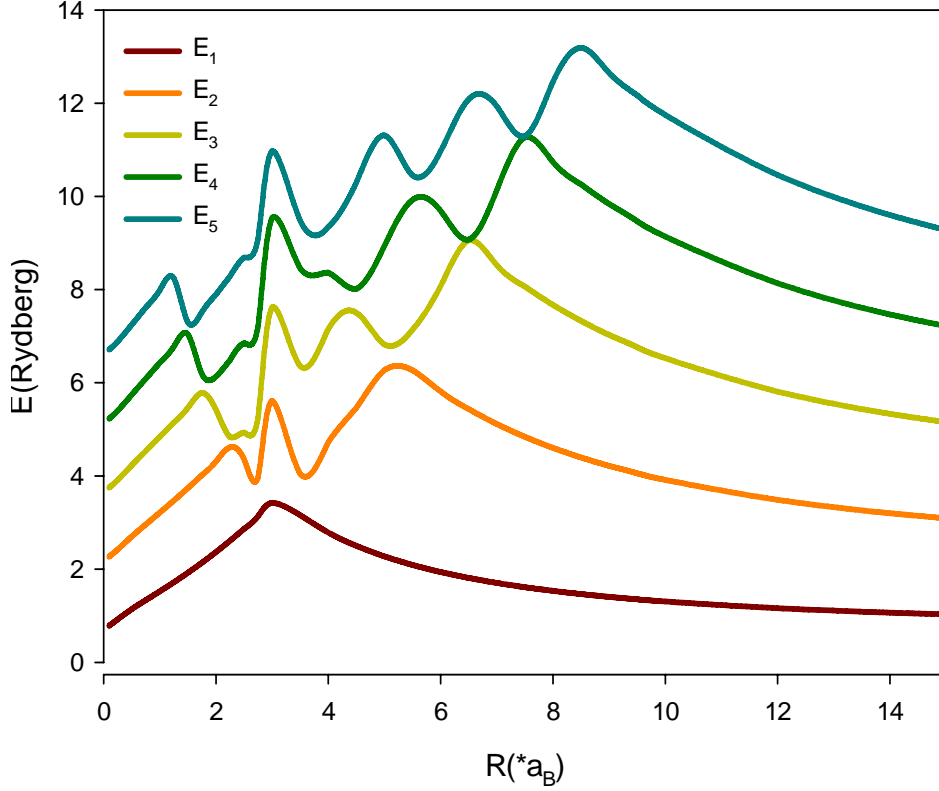
Parçacığın lokalizasyonunu incelemek için yarıçapın $R = a_B$ değerinde bazı manyetik alan değerleri için dalga fonksiyonlarının kareleri çizilmiştir.



Şekil-6.4. $R=a_B$ için bazı manyetik alan değerlerinde dalga fonksiyonunun karesinin çizimi. a) $B = 100$ kG, b) 200 kG , c) 400 kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.

Şekil 6.4' den de görüldüğü gibi manyetik alanın küçük değerleri için manyetik alan kuşatması daha etkin olduğundan dolayı parçacık tamamen kuyu dışında lokalize olmuştur (Şekil 6.4 (a)). Manyetik alan değeri artırıldığı zaman parçacık uzaysal kuşatmadan kaynaklanan potansiyeli de görmeye başlamış ve Şekil 6.3 (b))' den de görüldüğü gibi kuyu içersine sızmaya başlamıştır. Manyetik alanın değeri yeteri kadar artırıldığı zaman ise parçacıklar kuyu içerisinde lokalize olmuşlardır (Şekil 6.4 (c)).

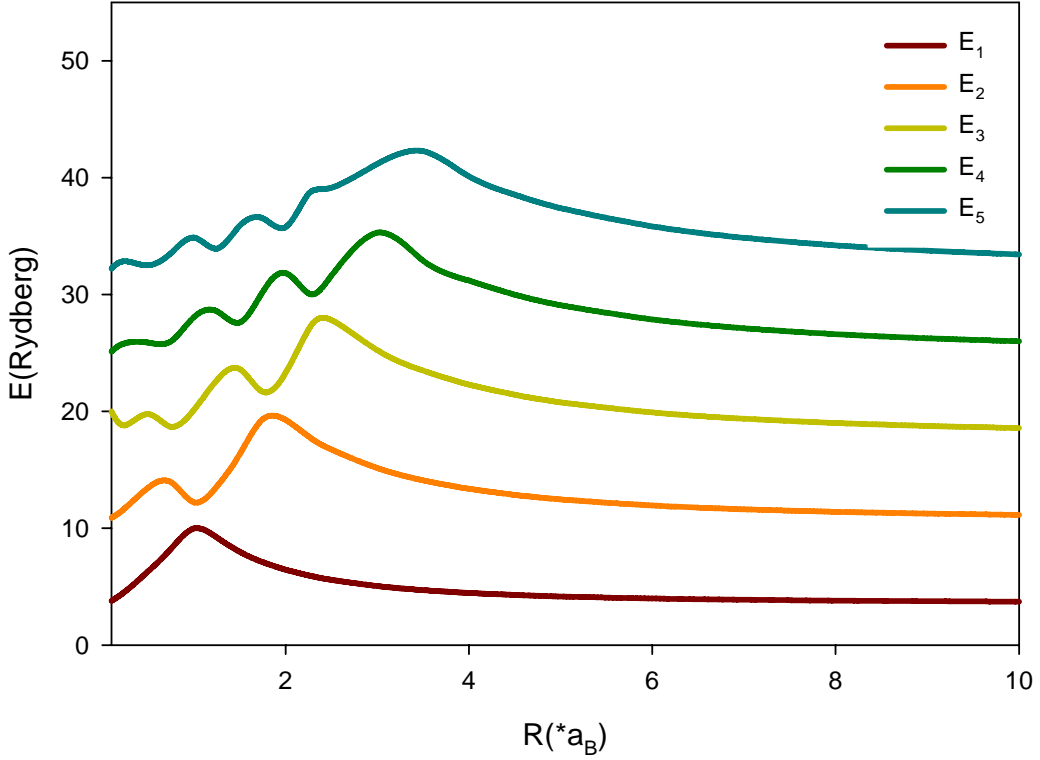
Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için son olarak manyetik alanın $B = 50$ kG ve $B = 240$ kG değerleri için yarıçapla ilk beş enerji düzeyinin değişimi incelenmiştir.



Şekil-6.5. Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için $B = 50$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs için Rydberg sabiti $R_B = 5.8$ meV ve a_B Bohr yarıçapı 98 \AA].

Yukarıdaki grafikten de görüldüğü gibi küçük yarıçap değerlerinde parçacığın enerji düzeyleri kuyu etkileri göstermektedir. Ancak yarıçap değeri arttıkça grafikten de görüldüğü gibi kuyu etkileri azalmakta ve manyetik alan etkileri artmaktadır. Belirli bir yarıçap değerinden sonra ise kuyu etkileri daha da azalmakta ve enerji düzeyleri Landau enerji düzeylerine oturmaktadır. Parçacık manyetik alanın küçük değerlerinde kuyu dışında lokalize olmuş ve kuyu etrafında büyük bir yarıçapta dönmektedir. Küçük yarıçap değerlerinde parçacık kuyuyu görmezken, yarıçap artırıldığında kuyuyu görmeye başlar ve belli bir yarıçap değerinden sonra kuyu içine girer ve parçacığın enerji düzeyleri kuyu etkileri gösterir. Parçacık kuyu içine girdikten sonra ise kuyu yarıçapının artırılması parçacığı daha da rahatlatacağından, kuyu yarıçapının artmasıyla parçacık parabolik kuşatmadan dolayı Landau enerji düzeylerine benzer enerji düzeylerine oturacaktır.

Ancak grafikten de görüldüğü gibi ilk enerji düzeyi dışında diğer enerji düzeylerinde bazı sapmalar görülmektedir. Bunun nedeni enerji düzeylerinin birbirine çok yakın olmasından dolayı parçacık alt enerji düzeyinde iken bir üst enerji düzeyini görmekte ve tünelleme yoluyla bu enerji düzeyine oturmaktadır. Bu durumsa grafikte enerji düzeylerinde görülen sapmalara sebep olmaktadır.



Şekil-6.6. Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için $B = 240$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs için Rydberg sabiti $R_B = 5.8$ meV ve a_B Bohr yarıçapı 98 \AA].

Şekil 6.6' dan da görüldüğü gibi büyük yarıçap değerleri için yukarıda Şekil 6.5 için söylenenler geçerli olmakla birlikte manyetik alanın değeri artınca kuyu etkisi daha küçük yarıçap değerlerine kadar görülmekte ve manyetik alandan kaynaklanan Landau enerji düzeyleri daha küçük yarıçap değerlerinde görülmektedir. Örneğin manyetik alanın $B = 50$ kG değeri için ikinci enerji düzeyinde kuyu etkisi $R = 7a_B$ değerine kadar görülürken, manyetik alanın $B = 240$ kG değeri için ikinci enerji düzeyinde kuyu etkisi $R = 3a_B$ değerine kadar görülmektedir. Ayrıca enerji düzeyleri arasındaki fark büyük olduğundan dolayı Şekil 6.5 için bahsedilen enerji düzeylerindeki sapmalar ve tünelleme burada gözlenmemektedir.

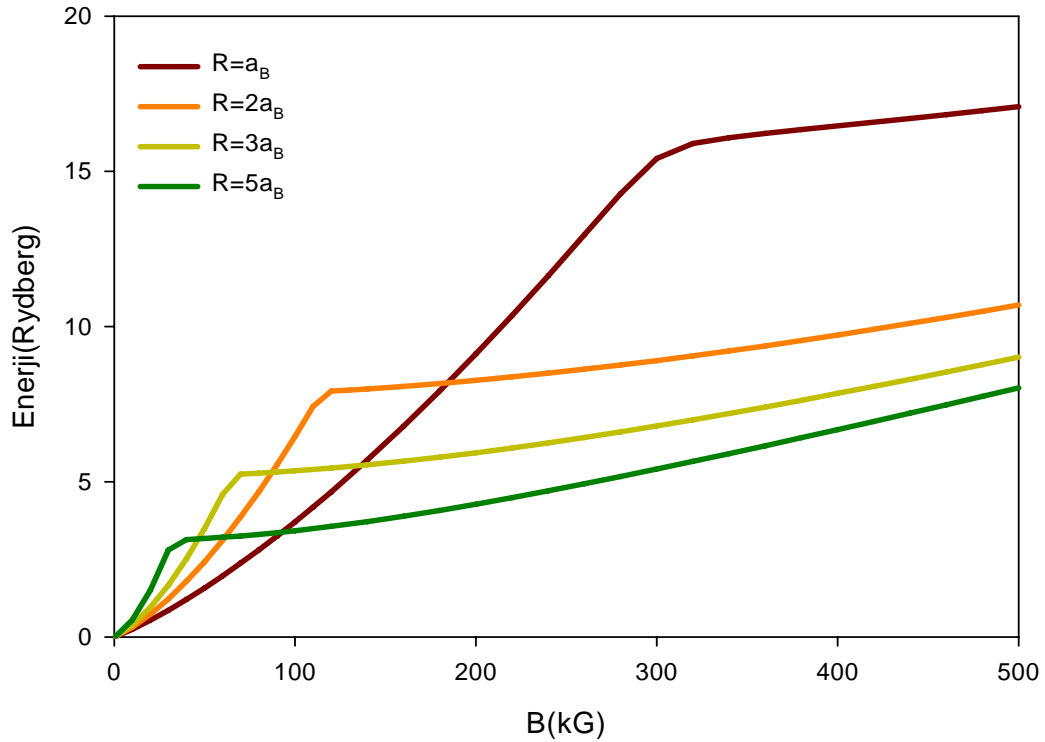
Burada manyetik alandaki artışın geçiş enerjisini de artırdığı görülmektedir.

Örneğin manyetik alanın $B = 50$ kG değeri için çizilen grafikte yarıçapın $R = a_B$ değeri için geçiş enerjisi yaklaşık olarak 3 Rydberg iken, manyetik alanın $B = 240$ kG değeri için aynı yarıçap değerinde yaklaşık 10 Rydberg' dir.

6.3.2 Al KONSANTRASYONU $x = 0.4$ İKEN ELDE EDİLEN VERİLER VE YORUMLAR

Bu bölümde yukarıda bölüm 6.3.1' de Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için tartışılan veriler Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri içinde tartışılacak, gerekli yorum ve karşılaştırmalar yapılacaktır.

Aşağıdaki Şekil 6.7' de Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için $R = a_B$, $2a_B$, $3a_B$, $5a_B$ değerleri için manyetik alanla enerji değişimleri verilmiştir.

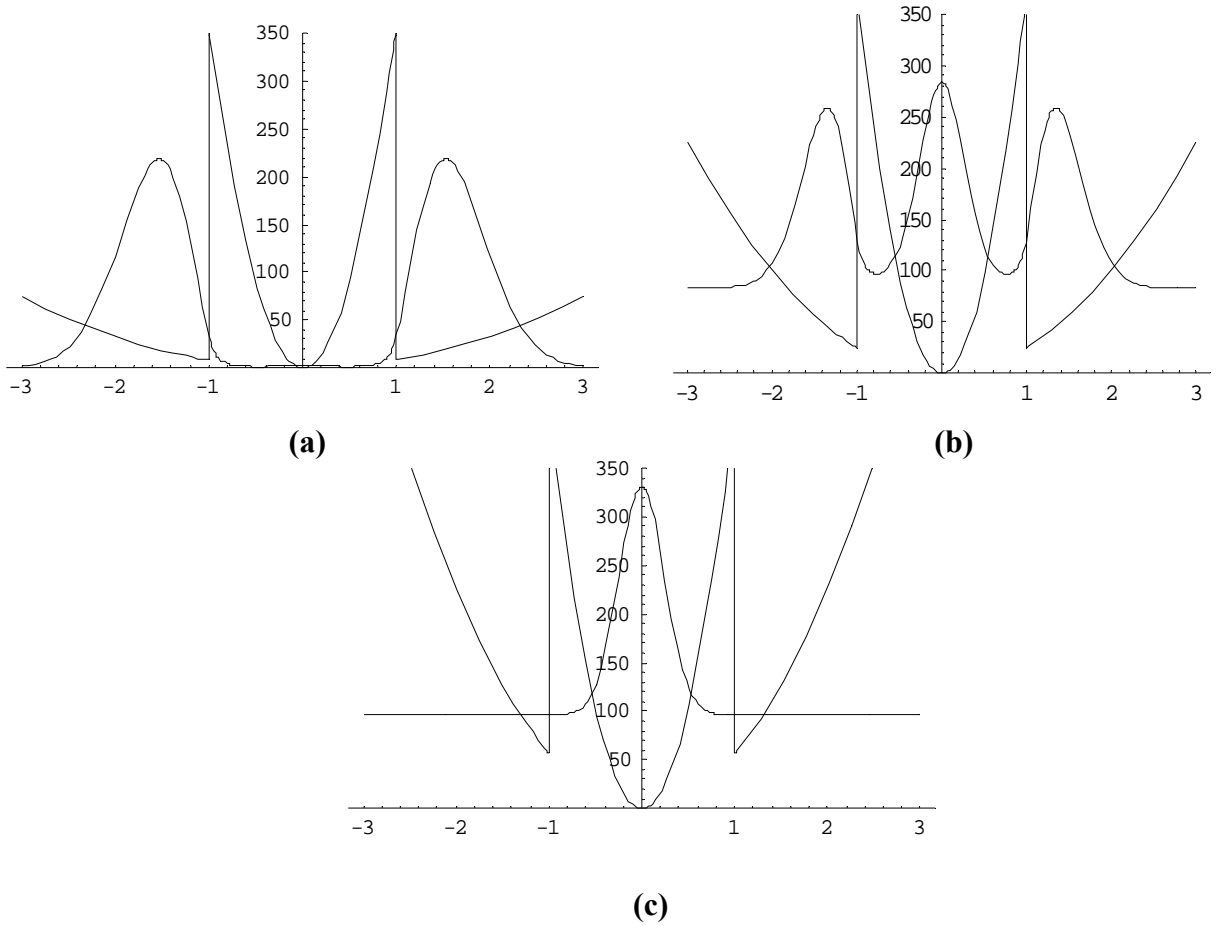


Şekil-6.7 Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için [GaAs içinde Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı 98 \AA] çift parabolik kuşatma altında manyetik alanla enerji değişimi.

Potansiyel kuyusunun yüksekliği, Al konsantrasyonu x ile orantılı olduğundan dolayı Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için potansiyel kuyusunun yüksekliği $x = 0.2$ değerinden daha fazladır ($x = 0.2$ iken $V_0 = 168.48$ meV, $x = 0.4$ iken $V_0 = 347.52$

meV' dur). Burada Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için söylenenler aynen geçerlidir. Ancak Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değerinde yukarıda tartışıldığı gibi potansiyel bariyerinin yüksekliği daha fazla olduğundan dolayı manyetik alan etkisi daha büyük manyetik alan değerlerinde görülmeye başlanır. Örneğin Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değerinde $R = a_B$ için manyetik alan etkisi manyetik alanın yaklaşık 240 kG değerinden sonra görülmeye başlanırken, Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değerinde yine $R = a_B$ için manyetik alan etkisi manyetik alanın 300 kG değerinden sonra görülmektedir.

Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için parçacığın lokalizasyonunu incelemek için yarıçapın $R = a_B$ değerinde bazı manyetik alan değerleri için dalga fonksiyonlarının kareleri çizilmiştir.

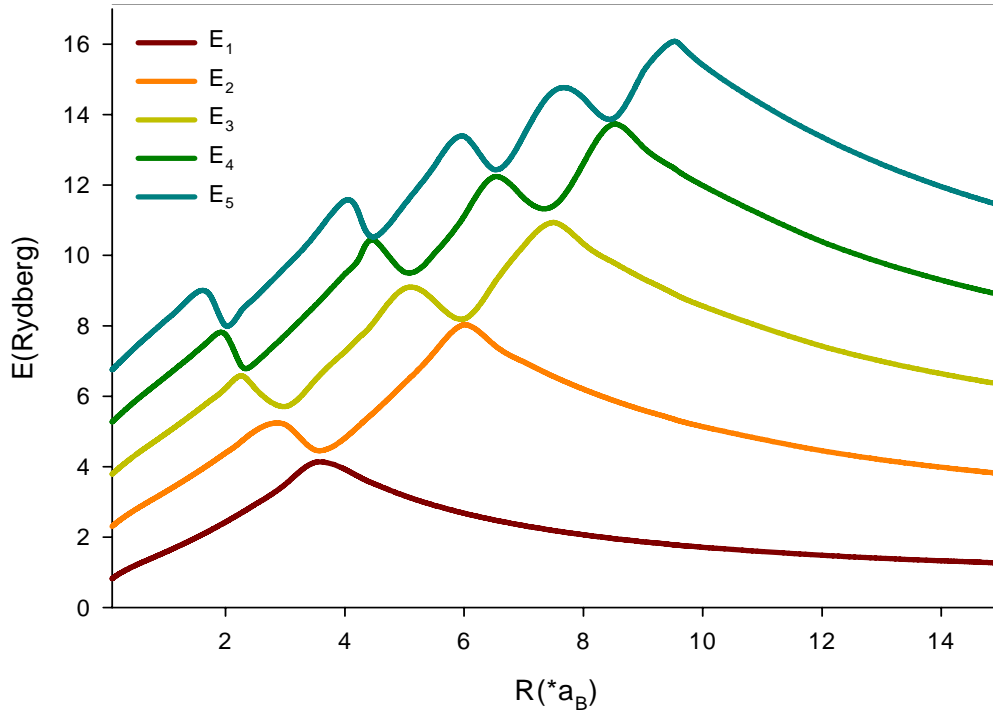


Şekil-6.8. $R=a_B$ için bazı manyetik alan değerlerinde dalga fonksiyonunun karesinin çizimi. a) $B = 160$ kG, b) 280 kG , c) 420 kG için dalga fonksiyonunun karesinin çizimi.

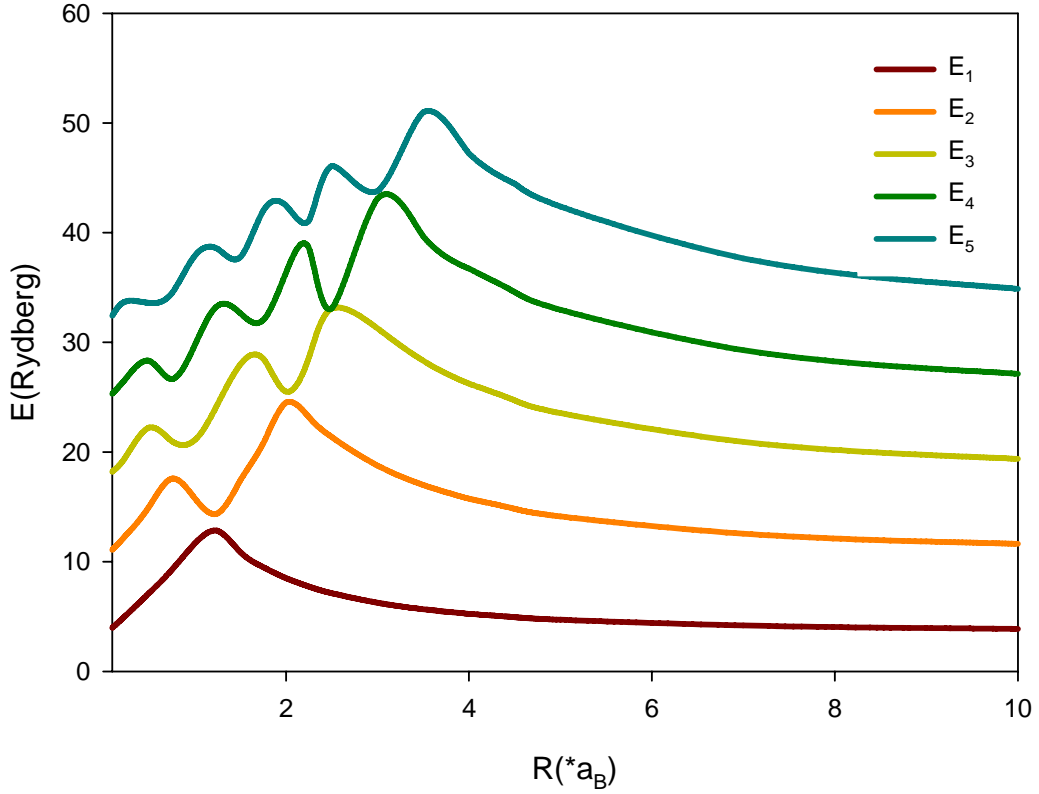
Şekil 6.8' den de görüldüğü gibi düşük manyetik alan değerlerinde parçacık manyetik

alandan kaynaklanan kuşatmanın etkisindedir ve kuyu dışında lokalize olmuştur (Şekil 6.8 (a)). Ancak manyetik alanın artmasıyla birlikte parçacık manyetik alandan kaynaklanan potansiyelin yanı sıra uzaysal kuşatmadan kaynaklanan potansiyeli de görmeye başlamış ve kuyu içerisine sızmaya başlamıştır (Şekil 6.8 (b)). Manyetik alanın büyük değerlerinde ise parçacık tamamen kuyu içerisinde lokalize olmuştur (Şekil 6.8 (c)). Ancak Şekil 6.4 ve Şekil 6.8 karşılaştırıldığında Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için kuyu yüksekliği, $x = 0.2$ değerindeki kuyu yüksekliğinden daha büyük olduğundan dolayı parçacığın kuyu içerisine sızması ve kuyu içerisinde lokalize olması için gereken manyetik alan değerinin de daha büyük olduğu görülür.

Şekil 6.9 ve Şekil 6.10' da manyetik alanın $B = 50$ kG ve 240 kG değerleri için yarıçapla ilk beş enerji düzeyinin değişimi verilmiştir.



Şekil-6.9. Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için $B = 50$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs içinde Rydberg sabiti $R_B = 5.8$ meV ve a_B Bohr yarıçapı 98 \AA].



Şekil-6.10. Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için $B = 240$ kG değerinde yarıçapla ilk beş enerji özdeğeri değişimi [GaAs içinde Rydberg sabiti R_B 5.8 meV ve a_B Bohr yarıçapı 98 \AA].

Şekil 6.9 ve Şekil 6.10' dan da görüldüğü gibi yarıçapın küçük değerleri için parçacığın enerji düzeyleri kuyu etkisi göstermektedir. Yarıçapın artması ile kuyu etkileri azalmakta ve belirli bir yarıçap değerinden sonra manyetik alan etkisi ile Landau enerji düzeyleri gözlenmektedir. Yukarıda Şekil 6.5' de iki, üç, dört ve beşinci enerji düzeylerinde gözlenen sapmalar ve tünelleme olayı burada enerji düzeylerinin birbirlerine çok yakın olmamasından dolayı gözlenmemektedir. Şekil 6.5, 6.6 ile Şekil 6.9, 6.10' u karşılaştırsak Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ olduğu durumda potansiyel kuyusunun yüksekliği daha fazla olduğundan dolayı kuyu etkileri daha büyük yarıçaplarda da görülür. Örneğin Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ olduğu durumda manyetik alanın $B = 240$ kG değerinde beşinci enerji düzeyi için Landau enerji düzeyleri ortalama $R = 3.5a_B$ değerinden sonra görülmeye başlanırken Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ olduğu durumunda $R = 5a_B$ değerinden sonra görülmeye başlanır.

7. SONUÇLAR

Yapılan bu çalışmada sistemin üzerine manyetik alan uygulanması ile sistemde oluşturulan parabolik kuşatmaya ek olarak uzaysal kuşatma da parabolik seçilerek ikincil bir parabolik kuşatma etkisi yaratılmış ve iki parabolik potansiyel arasında oluşan yükseklik farkından yararlanarak elektronlar iki parabolün üst üste geldiği yerde oluşan cepte lokalize edilerek bu yapının enerji düzeyleri hesaplanmıştır.

Çalışmanın ilk aşamasında Schrödinger denklemi sayısal hesaplamalara uygun hale getirilerek analitik olarak çözülebildiği kadar çözülmüş ve sayısal çözümler için gerekli bilgisayar programları yazılarak sistemin enerji özdeğerleri hesaplanmıştır.

İlk olarak Al konsantrasyonu $x = 0.2$ alınarak farklı silindir yarıçap değerlerinde manyetik alanla enerji değişimi incelenmiştir. Enerji manyetik alanın belirli bir değerine kadar daha hızlı artarken belirli bir manyetik alan değerinden sonra ise daha yavaş artmaktadır. Burada parçacık sürekli olarak parabolik kuşatmanın etkisinde Landau enerji düzeylerinde hareket etmektedir. Ancak küçük manyetik alan değerlerinde manyetik alandan kaynaklanan parabolik potansiyel etkisindeyken, manyetik alanın artmasıyla manyetik alandan kaynaklanan potansiyelin yanı sıra uzaysal kuşatmadan kaynaklanan parabolik potansiyelin etkisi de görülmeye başlanmış ve parçacık bu iki kuşatmadan kaynaklanan parabolik potansiyelde hareket etmiştir. Geçişlerin başladığı manyetik alan değerleri Çizelge 2 (a)' da verilmiştir. İkinci olarak ise manyetik alanın $B = 50$ kG ve 240 kG değerleri için yarıçapla ilk beş enerji düzeyinin değişimi incelenmiştir. Yarıçapın küçük değerlerinde enerji düzeyleri kuyu etkileri göstermektedir. Ancak belirli bir yarıçap değerinden sonra parçacık manyetik alandan kaynaklanan Landau enerji düzeylerine oturmaktadır. Landau düzeylerinin görülmeye başladığı yarıçap değerleri ise Çizelge 2 (a) ve (b)' de verilmiştir. Ancak manyetik alanının $B = 50$ kG değeri için enerji düzeylerinin birbirlerine yakın olmasından dolayı enerji düzeylerindeki sapmalar ve tünelleme olayı gözlenmektedir. Son olarak belirli manyetik alan değerleri için dalga fonksiyonlarının kareleri çizilerek parçacığın lokalizasyonu incelenmiştir. Manyetik alanın küçük değerlerinde manyetik alandan kaynaklanan kuşatma etkin olup parçacık kuyu dışında lokalize olmuştur. Ancak manyetik alanın artmasıyla (Çizelge 2 (a)' da verilen manyetik alan değerlerinden

sonra) manyetik alandan kaynaklanan kuşatmanın yanı sıra uzaysal kuşatma da etkili olmaya başlamış ve parçacık kuyu içerisine sızmaya başlamıştır. Manyetik alanın büyük değerlerinde ise parçacık kuyu içerisinde lokalize olmuştur.

Çizelge-2 : Al konsantrasyonunun $x = 0.2$ değeri için geçişlerin gözleendiği manyetik alan ve Landau düzeylerinin gözlenmeye başlandığı yarıçap değerleri. **a)** Yarıçapın $R = a_B, 2a_B, 3a_B, 5a_B$ değerleri için geçişlerin başladığı manyetik alanlar, **b)** Manyetik alanın $B = 50$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin görülmeye başlandığı yarıçap değerleri, **c)** Manyetik alanın $B = 240$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin görülmeye başlandığı yarıçap değerleri.

Yarıçap $R(*a_B)$	Geçişin Başladığı Manyetik Alan (kG)
a_B	210
$2a_B$	90
$3a_B$	40
$5a_B$	30

(a)

Enerji Düzeyi	Landau Düzeylerinin Gözlenmeye Başladığı Yarıçap $R(*a_B)$
E_1	3
E_2	5.5
E_3	6.5
E_4	7.5
E_5	8.5

(b)

Enerji Düzeyi	Landau Düzeylerinin Gözlenmeye Başladığı Yarıçap $R(*a_B)$
E_1	1
E_2	2
E_3	2.5
E_4	3
E_5	3.5

(c)

Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ olduğu durumda ise yukarıda söylenenler geçerli olmakla birlikte potansiyel bariyerinin yüksekliği $x = 0.2$ durumuna göre daha büyük olduğundan dolayı geçişler daha büyük manyetik alan ve enerji değerlerinde görülmeye başlanmış ve kuyu etkileri daha büyük yarıçaplara kadar görülmüştür. Bu durum Çizelge 2 ve Çizelge 3 karşılaştırılarak daha iyi anlaşılabilir.

Çizelge-3 : Al konsantrasyonunun $x = 0.4$ değeri için geçişlerin gözlemlendiği manyetik alan ve Landau düzeylerinin gözlenmeye başladığı yarıçap değerleri. **a)** Yarıçapın $R = a_B, 2a_B, 3a_B, 5a_B$ değerleri için geçişlerin başladığı manyetik alanlar, **b)** Manyetik alanın $B = 50$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin gözlenmeye başladığı yarıçap değerleri, **c)** Manyetik alanın $B = 240$ kG değeri için ilk beş enerji düzeyinde Landau düzeylerinin gözlenmeye başladığı yarıçap değerleri.

Yarıçap $R(*a_B)$	Geçişin Başladığı Manyetik Alan (kG)
a_B	280
$2a_B$	110
$3a_B$	70
$5a_B$	40

(a)

Enerji Düzeyi	Landau Düzeylerinin Gözlenmeye Başladığı Yarıçap $R(*a_B)$
E_1	3
E_2	6
E_3	7.5
E_4	8.5
E_5	9.5

(b)

Enerji Düzeyi	Landau Düzeylerinin Gözlenmeye Başladığı Yarıçap $R(*a_B)$
E_1	1.25
E_2	2
E_3	2.5
E_4	3.25
E_5	4

(c)

Bu çalışmada görülmüştür ki parçacık manyetik alana duyarlı lokalizasyonlar göstermektedir. Böylece yapı hiç değiştirilmeden manyetik alan şiddeti değiştirilerek parçacık istenilen yerde (kuyu içinde veya dışında) lokalize edilebilmektedir. Bu durum ise lazer, LED gibi aletlerin yapılmasında kullanılabilir.

8. EK A : HAMILTONYENİN DÜZENLENMESİ

Manyetik alan altında hareket eden parçacığın Hamiltonyeni;

$$H = \frac{(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m^*} + V(\rho, \phi) \quad (8.1)$$

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 hesaplırsak;

$$(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 = P^2 + \frac{e^2}{c^2} A^2 + \frac{e}{c} \vec{P} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{P} \quad (8.2)$$

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

$$[\vec{P}, \vec{A}] \Psi(\vec{r}) = (\vec{P} \vec{A} - \vec{A} \vec{P}) \Psi(\vec{r}) \quad (8.3)$$

Burada \vec{P} momentum operatörü yerine yazılırsa;

$$[\vec{P}, \vec{A}] = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \vec{A} \quad (8.4)$$

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

$$\vec{P} \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \vec{A} + \vec{A} \vec{P} \quad (8.5)$$

yazılabilir. Bulduğumuz bu ifadeyi (8.2) denkleminde yerine yazarsak;

$$\left(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = P^2 + \frac{e^2}{c^2}A^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\nabla}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{A}\vec{P} \quad (8.6)$$

olarak yazılabilir. Bu durumda (8.1) denklemi ile verilen Hamiltonyen ifadesi;

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \frac{1}{m^*} \left(\frac{e^2}{c^2}A^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\nabla}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{A}\vec{P} \right) + V(\rho, \phi) \quad (8.7)$$

olur. Burada;

$$P^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (8.8)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (8.9)$$

dir. Bu durumda;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + \frac{1}{m^*} \left(\frac{e^2}{c^2}A^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\nabla}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{A}\vec{P} \right) + V(\rho, \phi) \quad (8.10)$$

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

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) \quad (8.11)$$

dir. Burada \vec{A} ;

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ B_x & B_y & B_z \\ x & y & z \end{pmatrix} \quad (8.12)$$

olarak yazılırsa;

$$A_x = \frac{1}{2}(zB_y - yB_z), \quad A_y = \frac{1}{2}(xB_z - zB_x), \quad A_z = \frac{1}{2}(yB_x - xB_y) \quad (8.13)$$

olarak bulunur. Çalışmamızda manyetik alan z-yönünde uygulandığından;

$$B_x = 0, \quad B_y = 0, \quad B_z = B \quad (8.14)$$

olur. Bu ifadeler (8.10) ile verilen Hamiltonyen ifadesinde yazılıp düzenlenirse;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{i\hbar eB}{2m^* c} (x-y) \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m^* c^2} (x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (8.15)$$

olarak yazılabilir. Burada $-\frac{i\hbar eB}{2m^* c} (x-y) \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right)$ ifadesine Δ ifadesi deyip hesaplarsak;

$$\Delta = -\frac{i\hbar eB}{2m^* c} (x-y) \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (8.16)$$

$$\Delta = -\frac{eB}{2m^* c} \left(i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial z} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (8.17)$$

yazılabilir.

$$\Delta = -\frac{eB}{2m^* c} \left(i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial z} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (8.18)$$

olur. (8.18) denklemindeki $i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ 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 (8.18) denkleminde kullanılarak denkleminiz;

$$\Delta = -\frac{eB}{2m^* c} \left(-L_z - xP_x - xP_z + yP_y + yP_z \right) \quad (8.19)$$

olarak yazılabilir.

$$[P_x, x] = P_x x - x P_x = \frac{\hbar}{i} \quad (8.20)$$

komitasyon ifadesi kullanılarak;

$$x P_x = P_x x + i\hbar \quad (8.21)$$

yazılabilir. Son bulunan bu ifade (8.19) denkleminde kullanılarak Δ ifadesi;

$$\Delta = \frac{eB}{2m^* c} L_z \quad (8.22)$$

haline getirilir. Δ ifadesinin son hali (8.15) Hamiltonyen ifadesinde kullanılarak Hamiltonyenimiz;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{eB}{2m^* c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^* c^2} (x^2 + y^2) + V(x, y, z) \quad (8.23)$$

şeklinde yazılabilir.

9. EK B : SİLİNDİRİK KOORDİNATLARDA ∇^2 OPERATÖRÜ

Silindirik koordinatlarda;

$$\begin{aligned}x &= \rho \cos \phi \\y &= \rho \sin \phi \\z &= z\end{aligned}\tag{9.1}$$

$$\begin{aligned}dx &= \cos \phi d\rho - \rho \sin \phi d\phi \\dy &= \sin \phi d\rho + \rho \cos \phi d\phi \\dz &= dz\end{aligned}\tag{9.2}$$

şeklindedir. Bunu matris formunda;

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\rho \sin \phi \\ \sin \phi & \rho \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\rho \\ d\phi \end{pmatrix}\tag{9.3}$$

şeklinde yazabiliriz. Dönüşüm matrisi;

$$M = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\rho \sin \phi \\ \sin \phi & \rho \cos \phi \end{pmatrix}\tag{9.4}$$

şeklinde olur. Dönüşüm matrisi M 'in tersi;

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\frac{1}{\rho} \sin \phi & \frac{1}{\rho} \cos \phi \end{pmatrix}\tag{9.5}$$

şeklindedir. Bu durumda;

$$\begin{pmatrix} d\rho \\ d\phi \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix}\tag{9.6}$$

olur.

$$\begin{pmatrix} d\rho \\ d\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\frac{1}{\rho}\sin\phi & \frac{1}{\rho}\cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} \quad (9.7)$$

yazılırsa buradan;

$$\begin{aligned} d\rho &= \cos\phi dx + \sin\phi dy \\ d\phi &= -\frac{1}{\rho}\sin\phi dx + \frac{1}{\rho}\cos\phi dy \end{aligned} \quad (9.8)$$

olarak elde edilir. Kısmi türevlerden;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial\rho}{\partial y} \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \quad (9.9)$$

yazılabilir. Burada gerekli türevler alınarak;

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho}{\partial x} &= \cos\phi, \frac{\partial\rho}{\partial y} = \sin\phi \\ \frac{\partial\phi}{\partial x} &= -\frac{1}{\rho}\sin\phi, \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{1}{\rho}\cos\phi \end{aligned} \quad (9.10)$$

bulunur. Bu ifadeler (9.9) denkleminde yazılırsa;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos\phi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\phi \frac{\partial}{\partial\rho} + \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \quad (9.11)$$

şeklinde elde edilir. Buradan;

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\rho} + \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\rho} + \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \end{aligned} \quad (9.12)$$

yazılabilir. Yukarıdaki denklemde parantezler açılarak;

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = & \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \\ & - \frac{1}{\rho} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (9.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} = & \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho^2} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \\ & + \frac{1}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} - \frac{1}{\rho^2} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (9.14)$$

şeklinde elde edilir. Yukarıdaki ifadelerde gerekli sadeleştirmeler yapılarak;

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{2}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} + \frac{2}{\rho^2} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\rho} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (9.15)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \cos \phi \sin \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \phi} - \frac{2}{\rho^2} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (9.16)$$

olarak elde edilir. Böylece;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9.17)$$

Laplace denkleminin silindirik koordinatlardaki ifadesi yukarıda bulduğumuz ifadeler yerlerine yazılarak;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} [\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} [\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} [\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9.18)$$

şeklinde elde edilir. Burada;

$$[\cos^2 \phi + \sin^2 \phi] = 1 \quad (9.19)$$

eşitliği kullanılarak (9.18) ifadesi;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9.20)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) = \frac{\partial}{\partial \rho} + \rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \quad (9.21)$$

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

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \quad (9.22)$$

buradan;

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (9.23)$$

bulunur. Bu da ∇^2 ifadesinde yerine yazılarak;

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9.24)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9.25)$$

şeklinde elde edilmiş olur.

10. EK C : ÇİFT PARABOLİK KUŞATMA ALTINDA ENERJİ DÜZEYLERİ VE DALGA FONKSİYONLARININ BULUNMASI

Tel eksenine paralel uygulanan bir manyetik alan altında R yarıçaplı silindirik kuantum telindeki elektron-hole çiftinin etkileşimi için Hamiltonyeni;

$$H = \frac{(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m^*} + V(\rho, \phi) \quad (10.1)$$

ile verilir. Burada \vec{P} elektronun momentumunu, e elektronun yükünü, m^* elektronun etkin kütleini gösterir. \vec{A} ise $\vec{A} = \frac{(\vec{B} \times \vec{r})}{2}$ şeklinde tanımlanan vektör potansiyelidir.

Burada parabolik olarak seçilen skaler potansiyel $V(\rho, \phi)$ ise;

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} V_0 \left(\frac{\rho}{R} \right)^2, & \rho < R \\ 0 & , \rho > R \end{cases} \quad (10.2)$$

şeklinde tanımlanmıştır. \vec{P} momentum operatörü ve \vec{A} vektör potansiyelinin değeri yerine yazılırsa sistemin Hamiltonyeni;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} \rho^2 + V(\rho, \phi) \quad (10.3)$$

şeklinde elde ederiz. Burada L_z açısal momentum operatörünün z-bileşenidir.

Yapımız silindir şeklinde olduğundan dolayı Hamiltonyeni silindirik koordinatlarda çözmemiz daha kolay olacağından, Hamiltonyen silindirik koordinatlarda yazılırsa;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{eB}{2m^*c} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} \rho^2 + V(\rho, \phi) \quad (10.4)$$

olarak elde edilir. Enerji özdeğeri ve özfonksiyonları bulmak için;

$$H\Psi(\rho, \phi, z) = E\Psi(\rho, \phi, z) \quad (10.5)$$

özdeğer denklemi çözümlenmelidir.

Elektron z-yönünde serbest parçacık olduğundan dolayı z yönündeki çözüm için;

$$\Psi(z) = Ae^{ik_z z} \quad (10.6)$$

şeklinde serbest parçacık çözümü yazılabilir. Parçacık ϕ yönünde 2π periyoduna sahip olduğundan parçacığın ϕ yönündeki çözümü için;

$$\Psi(\phi) = Be^{im\phi}, \quad (m \text{ tamsayı}) \quad (10.7)$$

yazılabilir. Bu durumda sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu;

$$\Psi(\rho, \phi, z) = Ne^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) \quad (10.8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $U(\rho)$ parçacığın ρ yönündeki çözümü, N ise normalizasyon sabitidir. Enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonlarını bulmak için (10.8) ifadesi Schrödinger denkleminde yerine yazılırsa;

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) e^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) - \frac{\hbar^2}{2m^*} e^{im\phi} U(\rho) \frac{\partial^2}{\partial z^2} (e^{ik_z z}) + \frac{eB}{2m^* c} L_z e^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) + \\ & + \frac{e^2 B^2}{8m^* c^2} e^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) + V(\rho, \phi) e^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) = E e^{ik_z z} e^{im\phi} U(\rho) \end{aligned} \quad (10.9)$$

denklemi elde edilir. $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ ve $V(\rho, \phi) = V_0 \left(\frac{\rho}{R} \right)^2$ ifadeleri yerlerine yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa denklemimiz;

$$\frac{d^2 U(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dU(\rho)}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} U(\rho) - \left(\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} + \frac{2m^* V_0}{\hbar^2 R^2} \right) \rho^2 U(\rho) + \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} - \frac{eBm}{\hbar c} - k_z^2 \right) U(\rho) = 0 \quad (10.10)$$

haline gelir. Denklemi daha basit hale getirmek için $\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} + \frac{2m^* V_0}{\hbar^2 R^2}$ ifadesine ω^2 ,

$\frac{2m^*E}{\hbar^2} - \frac{eBm}{\hbar c} - k_z^2$ ifadesine de λ denirse;

$$\omega = \frac{eB}{2\hbar c} \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}m^*\omega_c^2 R^2}\right)^{1/2} \quad (10.11)$$

$$\lambda = \frac{2m^*E}{\hbar^2} - \frac{eBm}{\hbar c} - k_z^2 \quad (10.12)$$

olur. Burada $\omega_c = \frac{eB}{m^*c}$ şeklinde tanımlanan siklotron frekansıdır. (10.11) ve (10.12)

ifadeleleri (10.10) denkleminde yerlerine yazılırsa denklemimiz;

$$\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dU(\rho)}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} U(\rho) - \omega^2 \rho^2 U(\rho) + \lambda U(\rho) = 0 \quad (10.13)$$

şeklinde yazılabilir. Denklemi boyutsuz hale getirmek için;

$\xi = \omega\rho^2$ dönüşümü yapılırsa;

$$\frac{d}{d\rho} = 2\sqrt{\omega\xi} \frac{d}{d\xi} \quad (10.14)$$

$$\frac{d^2}{d\rho^2} = 4\omega\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\omega \frac{d}{d\xi} \quad (10.15)$$

ifadeleri elde edilir. Bu ifadeleri (10.13) denkleminde yazıp gerekli düzenlemeler yapılarak (10.13) denklemi;

$$\xi \frac{d^2U(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dU(\xi)}{d\xi} + \left(-\frac{m^2}{4\xi} - \frac{\xi}{4} + \frac{\lambda}{4\omega}\right)U(\xi) = 0 \quad (10.16)$$

haline dönüşür. Yukarıdaki ifade de $\frac{\lambda}{4\omega}$ ifadesini hesaplayıp yerine yazalım;

$\epsilon = E - \frac{P_z^2}{2m^*}$ şeklinde tanımlanırsa;

$\frac{\lambda}{4\omega} = \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{m}{2}\right) \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2}\right)^{-1/2}$ şeklinde yazılabilir. Burada $\left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2}\right)^{-1/2}$ ifadesine

λ_0 denirse;

$$\lambda_0 = \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2}\right)^{-1/2} \quad (10.17)$$

olur ve (10.16) denklemi;

$$\xi \frac{d^2 U(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dU(\xi)}{d\xi} + \left(-\frac{m^2}{4\xi} - \frac{\xi}{4} + \frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} \lambda_0 - \frac{m}{2} \lambda_0\right) U(\xi) = 0 \quad (10.18)$$

denklemine dönüşür. Bu denkleme asimtotik yaklaşım yöntemi uygulanarak çözüm elde edilebilir. Bu durumda bu denklemin $\xi \rightarrow 0$ ve $\xi \rightarrow \infty$ limit durumlarında asimtotik çözümlerine bakalım.

I. $\xi \rightarrow 0$ durumunda;

Yukarıdaki denklemdeki $-\frac{\xi}{4}$ terimi sıfırdır. Ayrıca $\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c}$ ve $-\frac{m}{2}$ terimleri sonsuza giden $-\frac{m^2}{4\xi}$ terimi yanında ihmal edilebilir. Bu durumda $\xi \rightarrow 0$ için denklem;

$$\xi \frac{d^2 U(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dU(\xi)}{d\xi} - \frac{m^2}{4\xi} U(\xi) = 0 \quad (10.19)$$

haline dönüşür. Elde ettiğimiz bu denklem için; $U(\xi) = \xi^s$ şeklinde bir deneme çözümü önerelim ve bunu yukarıdaki (10.19) denklemine yerine yazalım. Bunun için;

$$\frac{d^2}{d\xi^2} U(\xi) = s(s-1)\xi^{s-2} \quad (10.20)$$

$$\frac{d}{d\xi} U(\xi) = s\xi^{s-1} \quad (10.21)$$

şeklinde elde edilerek bu ifadeler (10.19) denklemine yazılırsa;

$$\xi s(s-1)\xi^{s-1} + s\xi^{s-1} - \frac{m^2}{4\xi}\xi^{s-1} = 0 \quad (10.22)$$

denklemini elde edilir. Bu denklem düzenlenirse;

$$s(s-1) + s - \frac{m^2}{4} = 0 \quad (10.23)$$

şeklinde elde edilir. Buradan da $s^2 = \frac{m^2}{4}$ bulunur. Yani $s = \pm \frac{m}{2}$ dir. Ancak $s = -\frac{m}{2}$ çözümü $\xi \rightarrow 0$ için ıraksayacağından fiziksel bir çözüm olmaz. Bu durumda $\xi \rightarrow 0$ için elde edeceğimiz çözüm;

$$U(\xi) = \xi^{\frac{|m|}{2}} \quad (10.24)$$

şeklinde olmalıdır.

II. $\xi \rightarrow \infty$ durumunda;

(10.18) denkleminin her iki tarafını ξ ile bölersek;

$$\frac{d^2U(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{dU(\xi)}{d\xi} + \left(-\frac{m^2}{4\xi^2} - \frac{1}{4} + \frac{1}{\xi} \frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} \lambda_0 - \frac{1}{\xi} \frac{m}{2} \lambda_0\right) U(\xi) = 0 \quad (10.25)$$

olarak elde ederiz. Elde edilen bu denklemde $\xi \rightarrow \infty$ durumunda;

$-\frac{m^2}{4\xi^2}$, $\frac{1}{\xi} \frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} \lambda_0$, $\frac{1}{\xi} \frac{m}{2} \lambda_0$ ve $\frac{1}{\xi} \frac{dU(\xi)}{d\xi}$ terimleri sıfırdır. Bu durumda geriye kalan ifade;

$$\frac{d^2}{d\xi^2} U(\xi) - \frac{1}{4} U(\xi) = 0 \quad (10.26)$$

şeklindedir. Bu diferansiyel denklemin çözümü ise; $U(\xi) = e^{\pm \frac{\xi}{2}}$ şeklindedir. Ancak bu

çözümde de $U(\xi) = e^{\frac{\xi}{2}}$ çözümü $\xi \rightarrow \infty$ durumunda ıraksar. Yani fiziksel değildir. Çünkü $\xi \rightarrow \infty$ durumunda çözüm sifira gitmelidir. Bu nedenle (10.25) diferansiyel denkleminin çözümü;

$$U(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \quad (10.27)$$

şeklinde olmalıdır.

Bu durumda asimtotik çözümlerini elde ettiğimiz (10.18) denkleminin genel çözümünü;

$$U(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \xi(\xi) \quad (10.28)$$

şeklinde yazabiliriz. Bu çözümde gerekli türevler alınıp (10.18) denkleminde yazılarak gerekli düzenlemeler yapılırsa (10.18) denklemi;

$$\xi \frac{d^2 \xi(\xi)}{d\xi^2} + (|m|+1-\xi) \frac{d\xi(\xi)}{d\xi} + \left[-\frac{|m|+1}{2} + \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{m}{2} \right) \lambda_0 \right] \xi(\xi) = 0 \quad (10.29)$$

denkleme dönüşür. Burada $-\frac{|m|+1}{2} + \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{m}{2} \right) \lambda_0$ ifadesine $a'_{|m|}$ denirse;

$$a'_{|m|} = -\frac{|m|+1}{2} + \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{m}{2} \right) \lambda_0 \quad (10.30)$$

olur. Bu durumda (10.29) denklemi;

$$\xi \frac{d^2 \xi(\xi)}{d\xi^2} + (|m|+1-\xi) \frac{d\xi(\xi)}{d\xi} + a'_{|m|} \xi(\xi) = 0 \quad (10.31)$$

denkleme dönüşür. Bu denklemin çözümü ise;

$$\xi(\xi) = A \text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi] + B \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi] \quad (10.32)$$

şeklinde verilir. Bu durumda (10.28) denklemi;

$$U(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} (A \text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi] + B \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi]) \quad (10.33)$$

denklemine dönüşür. Bu durumda en genel dalga fonksiyonu;

$$\Psi(\xi, \phi, z) = N e^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} (\text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi] + \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi]) \quad (10.34)$$

şeklinde verilir. Ancak $\xi \rightarrow 0$ durumunda $\text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi]$ fonksiyonu ıraksak olduğundan içerdeki dalga fonksiyonu;

$$\Psi_{i\zeta}(\xi, \phi, z) = B e^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi] \quad (10.35)$$

olur. $\xi \rightarrow \infty$ durumunda $\text{Laguerre}L[a'_{|m|}, |m|, \xi]$ fonksiyonu ıraksak olduğundan dışarıdaki dalga fonksiyonu;

$$\Psi_{dis}(\xi, \phi, z) = A e^{im\phi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \text{Hypergeometric}U[-a'_{|m|}, 1+|m|, \xi] \quad (10.36)$$

şeklinde verilir.

Enerji ifadesi ise (10.30) denkleminde yararlanılarak;

$$\epsilon = \hbar \omega_c \left[\frac{m}{2} + \left(a'_{|m|} + \frac{|m|+1}{2} \right) \frac{1}{\lambda_0} \right] \quad (10.37)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\epsilon = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ şeklinde tanımlanmıştır. Serbest parçacık

enerjisi $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ dikkate almazsak bu durumda enerji ifadesi;

$$E = \hbar\omega_c \left[\frac{m}{2} + \left(a'_{|m|} + \frac{|m|+1}{2} \right) \frac{1}{\lambda_0} \right] \quad (10.38)$$

şeklinde yazılabilir. Burada (10.17) denklemi ile verilen λ_0 ifadesi yerine yazılırsa;

$$E = \hbar\omega_c \left[\frac{m}{2} + \left(a'_{|m|} + \frac{|m|+1}{2} \right) \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2} \right)^{1/2} \right] \quad (10.39)$$

olur. Taban durumdaki enerjiler için $l = 1$ ve $m = 0$ olur ve enerji;

$$E = \hbar\omega_c \left[\left(a'_{01} + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{4V_0}{\frac{1}{2}\omega_c^2 R^2} \right)^{1/2} \right] \quad (10.40)$$

olarak bulunur.

11.KAYNAKLAR

- [1] Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics John Wiley & Sons, Inc., 1986
- [2] Jasprit Sing, Semiconductor Devices, McGraw-Hill Inc., 1994
- [3] Ben G. Streetman, Solid State Electronic Devices, Prentice-Hall Inc., 1990
- [4] Milton Abramowitz, Irene A. Segun, Handbook of Mathematical Functions. (Dover, New York, 1965) p. 504
- [5] M. Jaros, Physics And Application of Semiconductor Microstructures, Oxford University Press, New York, 1989
- [6] S. V. Branis , G. Li and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B 47 (1993) 1316
- [7] Herbert Kroemer, Band Diagrams of Heterostructure
- [8] Cheng-Ying Hsieh and Der-Sun Chuu, Journal of Applied Physics, (2001) 2241

12. ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı : Mehmet Osman USLU

Doğum Yeri-Yılı : Osmancık-1980

Medeni Durumu : Bekar

Lisans (1999-2003) : Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Edebiyat Fakültesi

Fizik Bölümü Sivas

Yüksek Lisans (2004-2006) : Cumhuriyet Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı Sivas

İÇİNDEKİLER

İÇİNDEKİLER.....	i
ÖZET.....	ii
SUMMARY.....	iii
TEŞEKKÜR.....	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	v
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	vii
1. GİRİŞ.....	1
2. KATILARDA BANT YAPILARI.....	2
3. YARIİLETKENLER.....	3
3.1. YARIİLETKEN MADDELERDE DOLAYLI VE DOLAYSIZ BANT GEÇİŞLERİ.....	5
3.2. KATKILI YARIİLETKENLER.....	7
4. HETEROYAPILAR.....	10
5. DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLER VE ÖNEMİ.....	14
5.1. KUANTUM KUYULARI, KUANTUM TELLERİ VE KUANTUM NOKTALARI.....	16
6. ÇİFT PARABOLİK KUŞATMA ALTINDA KUANTUM SİSTEMİ ELEKTRONİK ENERJİ DÜZEYLERİ.....	19
6.1. ENERJİ ÖZDEĞERİ VE DALGA FONKSİYONLARI.....	19
6.2. HESAPLAMALAR İÇİN KULLANILAN PARAMETRELER.....	23
6.3. VERİLER VE YORUMLAR.....	24
6.3.1. AI KONSTRASYONU $x = 0.2$ İKEN ELDE EDİLEN VERİLER VE YORUMLAR.....	24
6.3.2. AI KONSTRASYONU $x = 0.4$ İKEN ELDE EDİLEN VERİLER VE YORUMLAR.....	29
7. SONUÇLAR.....	33
8. EK A : HAMILTONYENİN DÜZENLENMESİ.....	36
9. EK B : SİLİNDİRİK KOORDİNATLARDA ∇^2 OPERATÖRÜ.....	40
10. EK C : ÇİFT PARABOLİK KUŞATMA ALTINDA ENERJİ DÜZEYLERİ VE DALGA FONKSİYONLARININ BULUNMASI.....	44
11. KAYNAKLAR.....	52
12. ÖZGEÇMİŞ.....	53