34310-

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

WANNİER-STARK LOKALİZASYONUNUN VARLIĞI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Rana AMCA

FİZİK ANABİLİM DALI

EYLÜL 1994
SİVAS

T.C.
CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

34310

WANNİER-STARK LOKALİZASYONUNUN VARLIĞI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Rana AMCA

FİZİK ANABİLİM DALI

İsmail SÖKMEN Fizik Bölümü-Prof. Dr.

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ'NE

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

Başkan Prof. Dr. Bünyamin ÖZBAY

Üye Prof. Dr. İsmail Gökmen

Üye Dr. Yüksel Ergün Yüksel Ergün

Üye..............................

Üye..............................

ONAY

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

15./11./1994

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ
Prof. Dr. Fuat ÖNDER
Müdür

Bu tez, Cumhuriyet Üniversitesi Senatosunun 05. 01. 1984 tarihli toplantısında kabul edilen ve daha sonra 30. 12. 1993 tarihinde C. Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü' nce hazırlanan ve yayınlanan "Yüksek Lisans ve Doktora Tez Yazım Kılavuzu" adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

İÇİNDEKİLER

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

Wannier-Stark Lokalizasyonunun Varlığı

Rana AMCA
Cumhuriyet Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman:Prof.Dr. İsmail SÖKMEN

Bu çalışmada, sonsuz kuyu dizilimli periyodik yapının N=11 kuyusu gözönüne alınarak elektrik alanı altında Wannier-Stark lokalizasyonu incelenmiştir. Çalışma altı bölümden oluşmaktadır. Giriş bölümünde, katıların enerji bandlarının yapısı, klasik yaklaşım ve kuantum mekaniksel olarak incelenmiştir. İkinci bölümde, kristalin periyodik bir kare-kuyu dizilimine sahip olduğu kabul edilerek bu yapıyı tanımlamada Bloch fonksiyonlarının kullanılması ve bu fonksiyonun özellikleri anlatılmıştır. Üçüncü bölümde Wannier-Stark lokalizasyonu başlığı altında Wannier-Stark Ladder yapısının keşfi ve bunun üzerinde yapılan çalışmalardan kısaca bahsedilmiş daha sonra Emin ve Hart'ın çözüm tekniği kullanılarak Wannier-Stark ladder'ın analitik hesabı ana hatları ile anlatılmıştır. Dördüncü bölümde, elektrik alanı uygulanan periyodik yapının geçiş matrisleri yöntemiyle çözümleri ve enerji özdeğerleri bulunmuştur. Daha sonra, aynı yapının enerji özdeğerleri sıkı bağlanma yaklaşımı kullanılarak bulunmuş ve sonuçta herbir kuyu için periyodik potansiyelin enerji özdeğerleri ile sıkı bağlanma yaklaşımıyla bulunan enerji özdeğerleri tablo halinde verilmiştir. Bu tabloda, herbir ardışık kuyuya yerleşmiş enerji düzeyleri arasındaki enerji farkları (ladderlar) gösterilmiştir. Grafikler bölümünde, elektrik alanının farklı değerlerine göre band enerji profilleri oluşturulmuştur. Daha sonra 1., 2. ve 3. band enerjilerinin farklı elektrik alan değerlerine göre grafikleri çizilerek yorumları yapılmıştır. Son olarak, sabit elektrik alan değerlerinde kuyu genişliği 5-150 Å aralığında değişirken band enerjilerinin değişimleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Kuantum kuyuları, Elektrik alan, Wannier-Stark Ladder.

ABSTRACT

M. Sc. Thesis

Existence of Wannier-Stark Localization

Rana AMCA
Cumhuriyet University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof.Dr. İsmail SÖKMEN

In this study, Wannier-Stark localization has been investigated, taking into consideration N=11 wells, which is formed of infinite number of periodic wells. This study consists of 6 chapters. In the introduction part the structure of the energy bands of solids has been investigated as classic approach and quantum mechanical. In the second chapter, by accepting that the crystal has a periodic arrangement of square-well, in decribing this function, the use of Bloch functions and charecteristics of this function has been mentioned. In chapter three, the discovery of Wannier-Stark ladder structure under the title of Wannier-Stark localization and other studies on this has been briefly mentioned, and then analitic calculation of Wannier-Stark ladder has been explanied in general, using solution technique of Emin and .Hart. In chapter four, periodic structure on which electric field is applied has been solved through transfer matris method, and eigenvalues have been obtained. Later, energy eigenvalues of the same structure has been found by using tight-binding approach and finally the energy eigenvalues of periodic potential for each well and energy eigenvalues found through tight-binding approaches have been given in a table. In this table, energy differences between energy levels (ladders), which placed in each consecutive well have been shown. In the section of graphics, band-energy profiles, according to different values of electric field have been formed, and then the graphics of 1st 2nd and 3rd band energies, according to different electric field, have been drawn and interpreted. As a result while the width of the well in constant electric field values changed at 5-150 Å intervals, the variation of band energies has been investigated.

Key Words: Quantum wells, Electric field, Wannier-Stark Ladder.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tez konusunu öneren ve bu çalışmayı yönlendiren, sonuçlandırılmasına kadar büyük dikkat ve titizlikle bilgi ve deneyimlerini esirgemeden ilgilenen danışman hocam, Prof. Dr. İsmail SÖKMEN'e ve çalışmamın her kademesinde yardımını gördüğüm Yrd. Doç. Dr. Hüseyin SARI'ya teşekkür ederim.

ŞEKİLLER DİZİNİ

ÇİZELGELER DİZİNİ

1-GİRİŞ

Sommerfeld'in kuantum mekanik modelinin başarılarına rağmen, alçak sıcaklıklarda elektronların serbest yollarının uzun olmasını, tünel olayını, metaller ve yalıtkanlar arasındaki büyük iletkenlik farkını açıklayamaması araştırıcıları metallere daha uygun düşen yeni modeller aramaya yöneltmiştir.

Sommerfeld modelinin en büyük eksikliği, metal içindeki potansiyelin periyodikliğinin dikkate alınmamış olmasıdır. Hesaplara kolaylık sağlaması bakımından katılar ve yarıiletkenlerin gerçek atomik potansiyelleri yerine model potansiyeller tercih edilir.

Katıların özelliklerini anlamamızda büyük bir katkı Bloch (1934) tarafından yapılmıştır. Bu çalışma "enerji bandları teorisi " diye bilinir.

Bu teoriye göre; madde gaz veya sıvı durumunda iken, atomlar arasındaki uzaklıklar bağıl olarak oldukça büyük, buna karşılık atomlar arası karşılıklı etkileşmelerse yok denecek derecede zayıftır. Birbirinden bağımsız ve serbest durumda bulunan her atom için kuantum koşullarına uygun olarak belirlenmiş bir elektron düzeni ve elektronların yeraldıkları enerji düzeyleri mevcutur. Katılarda ise, durum oldukça farklıdır. Atomlar arası uzaklığın azalması sonucu karşılıklı bağ kuvvetlerinin etkinlik kazanması maddeye özgü bir kristal yapı ve belirli bir simetrinin doğmasına yolaçmıştır. Böyle bir ortamdaki atomlar artık *birbirinden bağımsız (izole) biçimde düşünmek ve bunlara ait enerji düzeylerinden söz etmek anlamsız olur. Bunun yerine kristal örgü içindeki periyodik bir alanın etkisinde kalan elektronların, yine kuantum koşulları ile* belirli "enerji bandları " na sahip olduklarını söylemek daha uygundur.

Kuantum mekaniği; her elektronun diğerlerinden farklı bir potansiyelde olduğunu ve farklı bir enerji düzeyine yerleştiğini kabul eder. Her enerji bandı çok sayıda enerji düzeyini kapsamakta olup, düzeyler arasındaki uzaklıklar çok küçük dolayısıyla band içi yapısı bir anlamda sürekli kabul edilebilecek bir karakterdedir.

Sonuç olarak, bir katıda her atoma ait enerji düzeyleri birbirinin içine geçmekte, atomlar arasında etkisini hissettiren periyodik elektriksel alan değişimleri de, enerji düzeylerinin gruplar halinde toplanmasına ve böylece band yapısının doğmasına yolaçmıştır.

Katıların band modeli, katılarda elektronların iletkenlik olayına nasıl katıldığını açıklaması bakımından önemlidir. Eğer bir katının enerji band modeli biliniyorsa kristalin birçok özellikleri kolaylıkla açıklanabilir. Bandın detaylı yapısı, katıyı oluşturan atomların cinsine ve bunların biraraya geliş tarzına sıkı sıkıya bağlıdır.

Bloch' un teorisi bu konuda pek çok çalışmayı teşvik etmiştir. Çukurlar arasındaki bağlanma ve farklı potansiyel çukur derinliklerinin etkisini açıklayan dikkate değer bir çalışma da Kronig-Penny modelidir. Bu modelin önemli bir sonucu, serbest elektronun girilebilir enerji durumlarında sürekli bir spektrum yerine çukurlar arasında yasaklanmış bölgelerle biçimlenmiş enerji bandları vardır. Bu modelde çukurlar arasında bağlanma ve girilebilir enerji bandlarının değeri potansiyelin biçimine ve genişliğine bağlı olarak açıklanır [Gündüz,1989,Eroğlu, İşçi,1988].

2-BLOCH FONKSİYONLARI

Sommerfeld modelinin eksikliklerini tanımlamak için Bloch ilk kez kristalin periyodik özelliğe sahip olduğunu düşünerek düzlem dalga çözümüne bir çarpan eklemiştir. Yani katıdaki iletkenlik elektronlarının dalga fonksiyonunu;

$$\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\,\mathrm{Exp}\left[i\vec{k}\vec{r}\right] \qquad (2\text{-}1)$$

ile ifade edilebileceğini ortaya koymuştur. Denk (2-1) 'e " Bloch dalgaları " denir.

Bloch dalga fonksiyonunu tanımlamaya çalışalım;

Atomlar arası uzaklık " a " olmak üzere N.a uzunluğunda bir atom sistemi düşünelim. Bu sistemde potansiyel " a " periyodu ile değişsin. Yani;

$$V(x) = V(x + N.a) \qquad (2\text{-}2)$$

olsun. Burada n=0,1,2,..... gibi tamsayılardır. Sistemin simetri özelliğinden dolayı,

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \qquad (2\text{-}3)$$

Hamiltonian operatörünün özdeğer fonksiyonu $\psi(x)$,

$$\psi(x + a) = C\,\psi(x) \qquad (2\text{-}4)$$

bağıntısını sağlar. Burada C bir katsayıdır. Bu bağıntıdan yararlanarak;

$$\psi(x + N.a) = C^N \psi(x) = \psi(x) \qquad (2\text{-}5)$$

yazılabilir. Bunun sağlanması için de,

$$C = \mathrm{Exp}\left[i2\pi n/N\right] \tag{2-6}$$

olmalıdır.

Denk.(2-5) 'i sağlayacak bir fonksiyon,

$$\psi(x) = \mathrm{Exp}\left[ikx\right]U_n(x) \tag{2-7}$$

olabilir. Burada U(x), periyodu " a " olan periyodik bir fonksiyondur.

$$k = \frac{2\pi n}{N.a} \tag{2-8}$$

alınarak Denk.(2-7),

$$\psi(x) = \mathrm{Exp}\left[ikx\right]U(x) \tag{2-9}$$

yazılabilir. Bu ise tek boyutta Bloch dalga denklemidir. Bu denklem üç boyutta;

$$\psi(\vec{r}) = \mathrm{Exp}\left[i\vec{k}\vec{r}\right]U_n(\vec{r}) \tag{2-10}$$

şeklinde yazılabilir.

Bloch dalga fonksiyonu ideal bir örgü için " tek elektron " dalga fonksiyonudur. Bu modeldeki temel kabulleri şöyle sıralayabiliriz:

(i) Örgü periyodu ideal ise elektronlar saçılmaya uğramaz.

(ii) Fononlar, diğer elektronlar ve örgü kusurlarının sebep olduğu saçılmalar pertürbasyon olarak hesaba katılır.

(iii) " Çoklu elektron " problemi diğer bütün elektronların ortalama potansiyeli kullanılarak "tek elektron" problemine indirgenmiştir.

(iiii) Elektronlar arasındaki coulomb etkileşmesi ihmal edilmiştir.

Bloch modeline bazen "kristal yörünge metodu" da denilmektedir. Bunun *karşıtı olan yaklaşıma da " sıkı-bağ modeli " denir. Bu modelde her bir elektronun belirli bir atom civarında yeraldığı kabul edilir.*

3-WANNIER-STARK LOKALİZASYONU

3-1 GİRİŞ

N kare-kuyudan oluşan periyodik bir sistemde, tüm elektronik durumlar diğer potansiyel kuyularında bulunan özdeş elektronik durumlarla dejeneredir. Yani, bir elektronun bu kuyulardan herhangi birinde bulunma olasılığı eşittir. Bu dejenereliğin sonucu olarak, periyodik bir sistemin elektronik özdurumları, katı *boyunca yayılan lokalize olmamış durumların bandlarını oluştururlar.*

Böylesi bir periyodik sisteme elektrik alan uygulanması ile genellikle elektronik düzeyler arasındaki dejenerelik bozulur. Bunun sonucu olarak elektronik durumlar lokalize olabilirler. Bu lokalizasyon olayı, bir Brillioüin bölgesi sınırında yansıyan dalga vektörüne sahip elektronların elektrik alan tarafından ötelenmesi olarak ifade edilebilir [Emin,Hart,1987,Sökmen,1994].

Stark-Ladder kavramı, dizilim yönü elektrik alanla aynı olan periyodik bir sistemdeki elektronun enerji spektrumunu bulan Wannier tarafından ortaya atılmıştır. Wannier' in bu çalışmasıyla Wannier-Stark Ladder' lar birçok tartışma ve araştırmanın konusu olmuştur.

Başlangıçta birçok bilimadamı tarafından ladder' ın varlığına karşı çıkılmasına rağmen bugün onun varlığından şüphe edilmemekte ve deneylerle kanıtlanmaktadır.

Elektrik alan altında tek bandlı bir sistem sıkı-bağ yaklaşımı kullanılarak Saitoh tarafından çözüldü ve *ladderdaki* her bir düzeye ilişkin dalga fonksiyonlarının birinci tip Bessel fonksiyonları olduğu bulundu. Daha sonra *Fukuyama, Bari ve Fogedby iki banddan oluşan bir sistem üstünde çalıştılar ve iki Stark-Ladder' ın oluştuğu sonucuna vardılar. Fakat buldukları sonuçları (çiftlenim terimi) tam olarak açıklayamadılar* [Leo,MacKinnon,1991].

Emin ve Hart bir boyutta elektrik alan altındaki N kare-kuyu potansiyelden oluşan bir sistemin davranışı üzerinde durdular. Sözü edilen çalışmada, Emin ve Hart elektrik alanın böylesi periyodik bir dizilime etkisini iki bileşene ayırdılar. İlk etki bir potansiyel kuyusunun şeklini değiştiren periyodik bir testere-dişi (sawtooth) potansiyel, ikinci etki ise her potansiyel kuyusunun enerjisini bir diğerine göre eFa kadar kaydıran periyodik olmayan merdiven (step) tipi potansiyeldir.

Testere-dişi (sawtooth) potansiyel periyodik olduğundan sistemi *tanımlayan hamiltoniyenin periyodik bölümü ile birleştirilir ve bu periyodik bölüme periyodik potansiyel adı verilir [Emin,Hart 1987,Sökmen,1994].*

Periyodik potansiyelin elektrik alanına bağlı Bloch benzeri özfonksiyonları baz alınarak tam hamiltoniyenin özfonksiyonu seriye açılabilir. Bu süreç kavramsal ve hesap tekniği açısından doğrudur. Çünkü bu metod elektrik alan etkisini ikiye ayırmaktadır. Alana bağlı Bloch benzeri durumlarının baz olarak alınmasıyla periyodik potansiyelin herbir kuyusunun alana bağlı değişimi tümüyle gözönüne alınmış olur. Gerçekten de, baz durumları olarak alandan bağımsız Bloch durumları seçilirse potansiyel kuyularının elektrik alan altındaki değişimi, sistem bandlarının tümünün karışımını gerektirir. Ayrıca, verilen yaklaşımda elektrik alanına bağlı terim olan merdiven (step) tipi potansiyel, periyodik olmayan potansiyelin oluşumunda temel etki rolünü oynar ve sistemin özfonksiyonlarının lokalizasyonunu sağlayabilir.

Sadece bir enerji bandına sahip bir sistemde tüm Stark düzeyleri aynı ladder' a ait olacaktır. Yani tek bandlı bir sistemde oluşan enerji düzeylerinin *herbiri bir Stark-Ladder düzeyidir. Aynı band içerisinde yer alan Stark ladder' ların k dalga vektörleri farklı, n kuantum sayıları aynıdır.*

3-2 WANNIER-STARK LADDER ANALİTİK HESAP TEKNİĞİ

Wannier-Stark Ladder; periyodik bir sisteme uygulanan F elektrik alanı altında -e yüklü bir parçacığın Schrödinger denkleminin yazılmasıyla tanımlanır.

$$H\psi(x) = E\psi(x) \tag{3-2-1}$$

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(x) + eFx \tag{3-2-2}$$

Potansiyel V(x) periyodik olduğundan;

V(x+a)=V(x) ve " a " örgü sabiti olmak üzere Schrödinger denklemini yeniden düzenleyelim.

$$\left[\frac{p^2}{2m^*} + V(x) + eFx\right]\psi(x+a) = (E - eFa)\,\psi(x+a) \tag{3-2-3}$$

Böylece, enerjisi E olan herhangi bir state için örgü sabiti " a " ile değiştirilen konumu dışında, aynı dalga fonksiyonuna sahip ötelenmiş (E-eFa) enerjisinde özdeş bir durum vardır.

Şimdi çokbandlı bir sistemde oluşan değişimleri analitik olarak çözen Emin ve Hart' ın [1987] çözüm tekniğini kullanarak Wannier-Stark Ladder problemini çözmeye çalışalım;

Sistemin hamiltoniyeni, periyodik dişli potansiyelin sistemin periyodik potansiyeli ile birleştirilmesiyle oluşan bir periyodik kısım ve periyodik olmayan bir merdiven (step) tipi kısımdan oluşur.

$$H = H_F + (eFa)\sum_{m=1}^{N} S(x/a - m) \tag{3-2-4}$$

$$H_F = \frac{p^2}{2m^*} + V_F(x) \tag{3-2-5}$$

olarak yazılır.

Burada p momentum operatörü, $V_F(x+a)=V_F(a)$ " a " örgü sabiti olmak üzere kare-kuyu periyodik potansiyeli artı testere-dişi periyodik potansiyeldir.

S(x) gösterimi ile tanımladığımız adım fonksiyonu;

$$S(x)=\begin{cases}0 & x\langle 1\\ 1 & x\geq 1\end{cases} \tag{3-2-6}$$

özelliğine sahip bir fonksiyondur.

$$H_F=\frac{p^2}{2m^*}+V_F(x) \tag{3-2-7}$$

elektrik alana bağlı hamiltoniyenin kare-kuyu potansiyeli artı testere-dişi potansiyeline alana bağlı periyodik potansiyel diyeceğiz. Bu hamiltoniyenin özdeğer denklemi;

$$H_F\ \psi_{F,n,k}(x)=\varepsilon(F,n,k)\ \psi_{F,n,k}(x) \tag{3-2-8}$$

şeklinde yazılır ve bu Hamiltonian özfonksiyonu alana bağlı Bloch özfonksiyonlarıdır.

Burada $\varepsilon(F;n,k)$; n. elektronik enerji bandının k dalga vektörü ile gösterilen alana bağlı elektronik enerjidir. Bu Bloch fonksiyonlarının bir kümesi olduğu bilinen $\{\psi_{F;n,k}(x)\}$ kümesi bir tam set oluşturur.

$$\int_{cristal} dx.\ \psi^*_{F;n',k'}(x).\ \psi_{F;n,k}(x)=\delta_{n,n'}.\delta(k,k') \tag{3-2-9}$$

$$\sum_{n,k}\psi^*_{F;n,k}(x').\ \psi_{F;n,k}(x)=\delta(x-x') \tag{3-2-10}$$

Burada $\delta(k,k')$;

$$\delta(k,k')=\begin{cases}\delta_{k,k'} & \text{k kesikli ise}\\ \dfrac{2\pi}{a}\delta(k-k') & \text{k sürekli ise}\end{cases} \tag{3-2-11}$$

şeklinde tanımlanır.

Şimdi Wannier fonksiyonları ile Bloch fonksiyonları arasındaki alana bağlı ilişkiyi yazalım. $\psi_{F;n,k}(x)$, n. banddaki bir Bloch fonksiyonu olsun. O halde Wannier fonksiyonu;

$$W_{F;n}(x-pa)=N^{-1/2}\sum_{k}e^{-ikpa}\psi_{F;n,k}(x) \qquad (3\text{-}2\text{-}12)$$

olarak tanımlanır. Burada p, {p∈(0, N-1)} olacak şekilde yer (site) sayısıdır.

Bloch fonksiyonları ortanormal fonksiyonlar olduğundan Wannier fonksiyonları Bloch fonksiyonları cinsinden seriye açılabilir. Aynı şekilde Bloch fonksiyonlarını da Wannier fonksiyonları cinsinden yazabiliriz.

$$\psi_{F;n,k}(x)=N^{-1/2}\sum_{p}e^{ikpa}.W_{F;n}(x-pa) \qquad (3\text{-}2\text{-}13)$$

Alana bağlı Wannier fonksiyonlarının kapalılık ve ortanormalite özelliği, alana bağlı Bloch fonksiyonlarının ortanormalite ve kapalılık özelliğine uymaktadır.

$$\int_{cristal}dx.W^{*}_{F;n'}(x-p'a).W_{F;n}(x-pa)=\delta_{n,n'}.\delta_{p,p'} \qquad (3\text{-}2\text{-}14.a)$$

$$\sum_{n,p}W^{*}_{F;n'}(x'-pa).W_{F;n}(x-pa)=\delta(x-x') \qquad (3\text{-}2\text{-}14.b)$$

Q. özdeğer ε_Q 'ye karşılık gelen ve tam hamiltonian'ın çözümü olan özfonksiyonu alana bağlı Bloch fonksiyonları cinsinden seriye açabiliriz.

Lokalizasyon problemi nedeniyle, enerji bandlarını içeren ve pik yapan fonksiyonlar olan alana bağlı Wannier fonksiyonlarının seri açılımında kullanılması daha uygundur.

$$\psi_Q(x)=\sum_{n,p}c^{Q}_{n,p}.W_{F;n}(x-pa) \qquad (3\text{-}2\text{-}15)$$

Bu ifade uzun bir dizilimdeki bir elektronun elektronik durumlarının yaklaşık bir gösterimini verir.

Özfonksiyona tam Hamiltonian uygulanması ve $W^{*}_{F;n'}(x-p'a)$ ile çarpılmasıyla $c^{Q}_{n;p}$ ifade katsayıları için,

$$\sum_{n,p}\left\{\varepsilon_Q.\delta_{n,n'}.\delta_{p,p'}-\left\langle F;n',p'\middle|H\middle|F;n,p\right\rangle\right\}.c^{Q}_{n,p}=0 \qquad (3\text{-}2\text{-}16)$$

denklemini elde edebiliriz.

Tam Hamiltonian'ın Wannier fonksiyonları üzerinden matris elemanlarını, Bloch fonksiyonları cinsinden,

$$\langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = N^{-1}\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}\langle F;n',k'|H|F;n,k\rangle \quad (3\text{-}2\text{-}17)$$

biçiminde tanımlayabiliriz.

Bloch fonksiyonları cinsinden yazılan matris elemanlarının çözümünü ref.[1] deki gibi yazabiliriz.

$$\langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = N^{-1}.\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}.$$

$$\left\{\varepsilon(F;n,k).\delta_{n,n'}.\delta_{k,k'} + (eFa)\frac{N}{ia}\frac{\partial}{\partial k}\delta(k,k')I(n,k;n',k')\right\} \quad (3\text{-}2\text{-}18)$$

Burada;

$$I(n,k;n',k') = \int_0^a dx.\,\psi^*_{F;n',k'}(x).\,\psi_{F;n,k}(x) \quad (3\text{-}2\text{-}19)$$

birim hücredeki overlap fonksiyonudur. Denk.(18)'in düzenlenmesiyle;

$$\langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = \delta_{n,n'}.\varepsilon(F;n,p',p) +$$

$$(eFa)N^{-1}\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}\left[p.\,\delta_{k,k'}.N.I(n',k';n,k) - \frac{N}{ia}\delta_{k,k'}\frac{\partial}{\partial k}I(n,k;n',k')\right]$$

$$= \delta_{n,n'}.\left(\varepsilon(F;n,p',p+p(eFa).\delta_{p',p}\right) -$$

$$eFa\sum_{k} e^{ika(p'-p)}\frac{1}{ia}\frac{\partial}{\partial k}I(n',k';n,k)\Big|_{k=k'} \quad (3\text{-}2\text{-}20)$$

Burada;

$$\varepsilon(F;n,p',p)=\begin{cases} N^{-1}\sum_{k}\varepsilon(F;n,k).e^{ika(p'-p)} & \text{k kesikli ise} \\ \\ \dfrac{a}{2\pi}\int_{0}^{\frac{2\pi}{a}}dk.\varepsilon(F;n,k).e^{ika(p'-p)} & \text{k sürekli ise} \end{cases} \qquad (3\text{-}2\text{-}21)$$

Denk.(3-2-20)'yi incelersek: bandlararası matris elemanlarının, $\frac{\partial}{\partial k}I(n',k';n,k)\Big|_{k'=k}$ ifadesini içeren ikinci terimle verilebileceğini görürüz.

Ref. [1]'de belirtildiği gibi gerçekten de bu terim uzun dizilimler için ihmal edilebilir bir değere sahiptir.

Şimdi bunun basit bir ispatını yapalım;

Ortanormalite koşulunu k 'ya göre parçalı türevi içerecek şekilde overlap fonksiyonu cinsinden yazalım. Bu uygulama büyük N limitini gerektirir.

$$\frac{\partial}{\partial k}(\delta_{k,k'})\left\{\delta_{n,n'}-N.I(n',k';n,k)\right\}+$$

$$\delta_{k,k'}\left\{\frac{\partial}{\partial k}(\delta_{n,n'})-N\frac{\partial}{\partial k}I(n',k';n,k)\right\}=0 \qquad (3\text{-}2\text{-}22)$$

denklemini elde ederiz.

$k\neq k'$ **için** $\delta_{k,k'}=0$, $\frac{\partial}{\partial k}(\delta_{k,k'})=\frac{1}{e^{i(k-k')a}-1}$ *'dir ve bütün dalga* vektörleri (k,k') için kuvvetli koşul olan, $\delta_{n,n'}-N.I(n',k';n,k)=0$ denklemi elde edilir. Bunun anlamı $N\to\infty$ limitinde, alana bağlı periyodik potansiyelin farklı enerji bandları arasında overlapping (üstüste gelme) olmadığıdır.

$k = k'$ için $\text{limit}_{k \to k'} \dfrac{\partial}{\partial k}(\delta_{k,k'}) = \dfrac{(N-1)}{2}$ ve

$\delta_{n,n'} - N.I(n', k'; n, k) = 0$ aynı dalga vektörlü bandların ortanormalite koşuludur ve buradan kolayca,

$$\frac{\partial}{\partial k} I(n', k'; n, k) \Big|_{k'=k} = \frac{\partial}{\partial k}(\delta_{n,n'}) = 0 \qquad (3\text{-}2\text{-}23)$$

denkliğini görebiliriz.

Yukarıdaki tartışmada bandların ortanormalitesinin büyük N limitinde $k = k'$ olsa bile, $\delta_{n,n'} = N\,I(n', k'; n, k)$ eşitliği ile verileceği sonucunu çıkarabiliriz.

Denk.(3-2-20)'nin içerisine Denk.(3-2-23)'ün yerleştirilmesi ile alana bağlı Wannier fonksiyonları üzerinden matris elemanları;

$$\langle F; n', p' | H | F; n, p \rangle = \delta_{n,n'} \cdot \left(\varepsilon(F; n, p', p) + p(e F a)\, \delta_{p,p'} \right) \qquad (3\text{-}2\text{-}24)$$

şeklinde olacaktır.

Denk.(3-2-24)'ün Denk.(3-2-16)'ya yerleştirilmesiyle;

$$\sum_{n,p} \delta_{n,n'} \left\{ \varepsilon_Q\, \delta_{p',p} - \left(\varepsilon(F; n, p', p) + p(e F a)\delta_{p',p} \right) \right\} c^{Q}_{n,p} = 0 \qquad (3\text{-}2\text{-}25)$$

olarak ifade katsayısı için bir denklem yazabiliriz. Burada farklı enerji bandlarına karşılık gelen ifade katsayılarının birbirlerinden bağımsız olduğu görülür. Böylece enerji özdeğerleri tek bandda olduğu gibi, bulunan secular determinantın karakteristik denkleminden tanımlanır.

Şimdi ladder yapısını gösterelim;

Bunun için n. bandın ihmal edilebilir bir kalınlığa sahip olduğunu düşünelim. Bu durumda Bloch dalga vektörleri ile tanımlanmış olan tüm elektronlar n. bandda aynı $\varepsilon(F; n)$ enerjisine sahip olacaktır.

Denk.(3-2-25)'deki bandiçi matris elemanlarının ilk terimi,

$$\varepsilon(F; n, p', p) = \varepsilon(F; n)\delta_{p',p} \qquad (3\text{-}2\text{-}26)$$

şeklinde olacaktır.

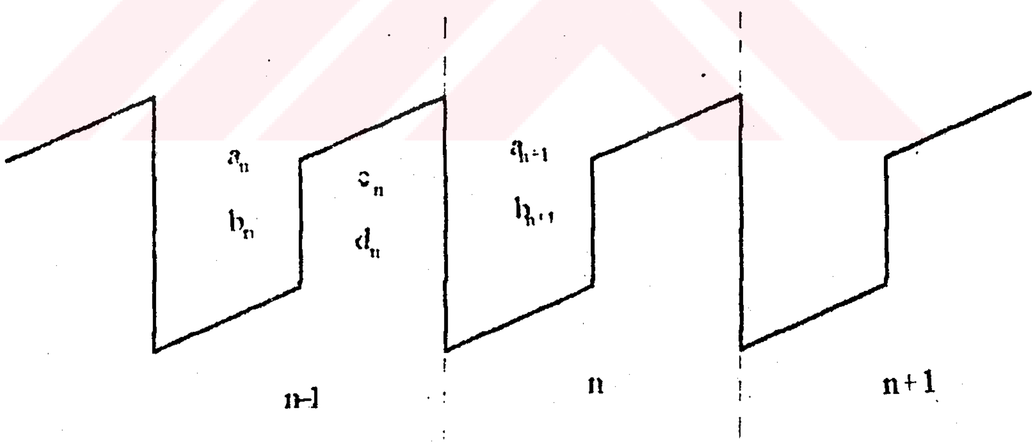
Sistemin özenerjileri analitik olarak;

$$\varepsilon_Q = \varepsilon(F;n) + p(eFa); \qquad Q = \{n,p\} \tag{3-2-27}$$

biçiminde bulunabilir.

n. banddaki Wannier-Stark lokalizasyonunun özdeğerleri sadece böyle bir durumda bir ladder yapısını verir.

Burada dikkat edilirse $F \to 0$ limitinde Wannier-Stark ladder'ı Bloch elektronlarının özdeğerlerini verir. Bu da bize, başlangıçta kurulan düşüncenin doğruluğunu gösterir.



Şekil.4-2-1. Sonsuz dizilimli periyodik örgünün elektrik alanı altındaki periyodik bölümü.

4-PERİYODİK POTANSİYEL VE ÖZDEĞERLER

4-1-GİRİŞ

Birbirinden farklı iki yarıiletkenin biraraya getirilmesi ile oluşan yapıya yarıiletken literatüründe heteroyapı adı verilir. Heteroyapıyı oluşturan külçelerin benzer yapıda olmaları, uygulamada önemli sonuçların alınmasını sağlar. Aynı zamanda bu koşul ile elektron dalga vektörünün ara yüzeyde değişmemesi de sağlanmış olur. *Heteroyapıyı oluşturan bir yarıiletkenin kristal potansiyeli ile elektronik yapısının ara yüzey dizilimine kadar değişmediği kabul edilir. Ara yüzeyde külçenin özelliklerini sergileyecek biçimde değişir. Bu tür yapıların* peşpeşe birbirlerine eklenmesi ile "kuantum çukurları " dediğimiz yapılar ortaya çıkar.

Statik elektrik alanının katılardaki elektronik durumlar üzerindeki etkileri son yıllarda büyük bir ilgi alanı oluşturmuştur. Yarıiletken kuantum çukurlarında yük taşıyıcılarının bir boyutlu potansiyel içine kuşatılmaları kesikli enerji *durumlarının oluşmasını sağlar. Bu da elektronik yapıda önemli değişimlere neden olur.*

4-2 ÖZDEĞERLER VE DALGA FONKSİYONLARININ BULUNMASI

Bu bölümde $\vec{F}$ elektrik alanı altında N kare kuyu dizilimli bir sistemi *inceleyeceğiz. Sistemi tanımlayan toplam Hamiltonian'ı,*

$$H = H_F + \sum_{m=1}^{N} S(x/a - m) \tag{4-2-1}$$

şeklinde tanımlarız. Burada,

$$H_F = \frac{p^2}{2\,m} + \sum_{m=1}^{N} V_E(x/a - m) \tag{4-2-2}$$

şeklinde tanımlanan Hamiltonian'ın elektrik alana bağlı periyodik bölümüdür.

Sistemin Schrödinger denklemi;

$$\left[\frac{p^2}{2\,m} + \sum_{m=1}^{N} V_E(x - ma) + \sum_{m=1}^{N} S(x/a - m)\right].\psi(x) = E\,\psi(x) \tag{4-2-3}$$

olacaktır.

Sistem profili Şek.4-2-1'de gösterilmiştir. Kuyu ve bariyer için Schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E\,\psi_1(x) \tag{4-2-4}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + V_0\psi_2(x) = E\,\psi_2(x) \tag{4-2-5}$$

şeklindedir.

Normalize parametreler olarak $\tilde{E} = E/E_1^{(0)}$, $\tilde{F} = eFL/E_1^{(0)}$, $\tilde{x} = x/L$'yi *tanımlarız. Elektrik alan yokken sistemin özenerjisi;*

$$E_n^{(0)} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m_x L^2} \tag{4-2-6}$$

ile verilir. Normalize parametreleri tanımlarken kullandığımız $E_1^{(0)}$, $E_n^{(0)}$ eşitliğinde n=1 taban durum enerjisidir.

Bu normalize parametreler kullanılarak Denk.(4-2-4) ve Denk.(4-2-5);

$$\frac{d^2\tilde{\psi}_1(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2}+\pi^2\left[E-F(x-(n-1))\right].\psi_1(x)=0 \qquad (4\text{-}2\text{-}7)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\pi^2\left[E-V_0-F(x-(n-1))\right].\psi_2(x)=0 \qquad (4\text{-}2\text{-}8)$$

elde edilir.

$$Z_k(x)=-\left(\frac{\pi}{F}\right)^{2/3}.\left(E-F(x-(n-1))\right) \qquad (4\text{-}2\text{-}9)$$

$$Z_b(x)=-\left(\frac{\pi}{F}\right)^{2/3}.\left(E-V_0-F(x-(n-1))\right) \qquad (4\text{-}2\text{-}10)$$

dönüşümü ile Denk.(4-2-7) ve Denk.(4-2-8) yeniden yazılırsa;

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}-Z_k(x)\psi_1(x)=0 \qquad (4\text{-}2\text{-}11)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-Z_b(x)\psi_2(x)=0 \qquad (4\text{-}2\text{-}12)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemlerin genel çözümleri Airy fonksiyonları olacaktır.

$$\psi_1(x)=A_n.\mathrm{AiryAi}\left[Z_k(x)\right]+B_n.\mathrm{AiryBi}\left[Z_k(x)\right] \qquad (4\text{-}2\text{-}13)$$

$$\psi_2(x)=C_n.\mathrm{AiryAi}\left[Z_b(x)\right]+D_n.\mathrm{AiryBi}\left[Z_b(x)\right] \qquad (4\text{-}2\text{-}14)$$

(n-1). bölgedeki kuyu ve bariyer için dalga fonksiyonları tanımlanmış olur. Aynı formda n. bölgedeki dalga fonksiyonu;

$$\psi_3(x)=A_{n+1}.\mathrm{AiryAi}\left[Z_{k+1}(x)\right]+B_{n+1}.\mathrm{AiryBi}\left[Z_{k+1}(x)\right] \qquad (4\text{-}2\text{-}15)$$

biçimindedir. Burada tanımlanan;

$$Z_{k+1}(x)=-\left(\frac{\pi}{F}\right)^{2/3}.\left(E-F(x-n)\right) \qquad (4\text{-}2\text{-}16)$$

şeklinde olacaktır.

Schrödinger denkleminin çözümünde kullanılan normalize parametreler ve yapılan dönüşüm, problemi parçacıktan bağımsız evrensel bir duruma getirir. Bu da herhangi bir parçacık için (elektron veya boşluk) $E_1^{(0)}$ değerini alarak master denklemini kullanmamıza olanak sağlar.

Çalışmamızda N=11 kuyu gözönüne alınarak $x \rightarrow (x - L_w / 2Lam)$ dönüşümü ile başlangıç noktası kuyuların ortasına yerleştirilmiştir. $L_w = 50$, $L_B = 30$ ve $Lam = L_w + L_B$ olacak şekilde;

$$Z_k(x) = -\left(\frac{\pi}{F}\right)^{2/3} .\left(E - F(x - 5/16 + 1)\right) \tag{4-2-17}$$

$$Z_b(x) = -\left(\frac{\pi}{F}\right)^{2/3} .\left(E - V_0 - F(x - 5/16 + 1)\right) \tag{4-2-18}$$

$$Z_{k+1}(x) = -\left(\frac{\pi}{F}\right)^{2/3} .\left(E - F(x - 5/16)\right) \tag{4-2-19}$$

verilmiştir.

x= -b ve x=0 sınır noktalarında süreklilik koşulu kullanılarak kuyu ve bariyeri tanımlayan dalga fonksiyonlarının kendileri ve türevleri eşitlenir.

$$\psi_1(x)\Big|_{x=-b} = \psi_2(x)\Big|_{x=-b} \qquad \frac{d\psi_1(x)}{dx}\Big|_{x=-b} = \frac{d\psi_2(x)}{dx}\Big|_{x=-b} \tag{4-2-20}$$

$$\psi_2(x)\Big|_{x=0} = \psi_3(x)\Big|_{x=0} \qquad \frac{d\psi_2(x)}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi_3(x)}{dx}\Big|_{x=0} \tag{4-2-21}$$

Böylece matris gösterimi ile;

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & \ell \\ m & n \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix} \text{ ve} \tag{4-2-22}$$

$$\begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & s \\ r & t \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \tag{4-2-23}$$

denklemler takımı elde edilir. (n-1). bölgedeki katsayılar geçiş matrisleri yöntemi kullanılarak n. bölgedeki katsayılar cinsinden yazılabilir.

$$M1=\begin{pmatrix} k & \ell \\ m & n \end{pmatrix} \text{ ve } M2=\begin{pmatrix} p & s \\ r & t \end{pmatrix} \text{ ise}$$

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = M1.M2.\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \tag{4-2-24}$$

şeklinde (n-1). bölgedeki kuyudan n. bölgedeki kuyuya geçiş matrisi tanımlanabilir.

$$M = M1.M2 \quad \text{ise} \quad M=\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \tag{4-2-25}$$

şeklinde yine bir kare matristir. O halde;

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \tag{4-2-26}$$

olarak yazılabilir.

Bloch formalizasyonunu hatırlayalım;

$$\psi(x) = \psi(x+\wedge).e^{-iK\wedge} \tag{4-2-27}$$

$\wedge$ burada bir birim hücre uzunluğunu temsil eder.

Matris formuyla yazacak olursak;

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} .e^{-iK\wedge} \tag{4-2-28}$$

olacaktır. Bizim bulduğumuz matris formunu da hatırlayarak (Denk.(4-2-26)) birbirine eşitleyelim;

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = e^{-iK\wedge} . \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \tag{4-2-29}$$

$n+1 \rightarrow n$ dönüşümü yaparsak,

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = e^{-iK\wedge} . \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \tag{4-2-30}$$

elde edilir.

$$A.A_n + B.B_n = e^{-iK\wedge}.A_n$$
$$C.A_n + D.B_n = e^{-iK\wedge}.B_n \qquad (4\text{-}2\text{-}31)$$

matrisin açık formudur. Bunu düzenlersek;

$$\left(A - e^{-iK\wedge}\right).A_n + B.B_n = 0$$
$$C.A_n + \left(D - e^{-iK\wedge}\right).B_n = 0 \qquad (4\text{-}2\text{-}32)$$

elde ederiz. Buradan katsayılar determinantını yazabiliriz.

$$\begin{vmatrix} A - e^{-iK\wedge} & B \\ C & D - e^{-iK\wedge} \end{vmatrix} = 0 \qquad (4\text{-}2\text{-}33)$$

Bu determinantın köklerini bulalım;

$$\left(A - e^{-iK\wedge}\right).\left(D - e^{-iK\wedge}\right) - B.C = 0$$
$$A.D - A.e^{-iK\wedge} - D.e^{-iK\wedge} + e^{-2iK\wedge} - B.C = 0 \qquad (4\text{-}2\text{-}34)$$
$$e^{-2iK\wedge} - (A + D).e^{-iK\wedge} + (A.D - B.C) = 0$$

elde edilir.

$M = \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}$ olduğunu hatırlarsak;

detM=A.D-B.C olacaktır. Denk.(4-2-34) eşitliğini buna göre düzenleyelim:

$$e^{-2iK\wedge} - (A + D).e^{-iK\wedge} + \det M = 0 \qquad (4\text{-}2\text{-}35)$$

$$e^{-iK_{1,2}\wedge} = \frac{(A + D) \mp \sqrt{(A + D) - 4.\det M}}{2}$$
$$(4\text{-}2\text{-}36)$$
$$e^{-iK_{1,2}\wedge} = \frac{1}{2}(A + D) \mp \frac{1}{2}\sqrt{4\det M.\left[\frac{(A + D)^2}{4\det M} - 1\right]}$$

$$e^{-iK_{1,2}\wedge} = \frac{1}{2}(A+D) \mp i\sqrt{\det M}.\left\{\sqrt{1-\left[\frac{A+D}{2\sqrt{\det M}}\right]^{2}}\right\}$$

$$e^{-iK_{1,2}\wedge} = \sqrt{\det M}\left\{\frac{A+D}{2\sqrt{\det M}} \mp \sqrt{1-\left[\frac{A+D}{2\sqrt{\det M}}\right]^{2}}\right\} \qquad (4\text{-}2\text{-}37)$$

Uniter bir matriste detM=1 olduğunu biliyoruz. Denk.(4-2-37) düzenlenirse;

$$e^{iK_{1,2}\wedge} = \frac{1}{2}(A+D) \mp i\left\{1-\left[\frac{1}{2}(A+D)^{2}\right]\right\}^{1/2} \qquad (4\text{-}2\text{-}38)$$

Denk.(4-2-38)'de bulduğumuz kökün;

$e^{-iK_{1,2}\wedge} = \cos(K\wedge) + i\sin(K\wedge)$ genel formunda olduğunu görebiliriz. Bu durumu inceleyelim:

i) $\cos(K\wedge) = \frac{1}{2}(A+D)$ ise;

$\frac{1}{2}(A+D) < 1$ iken $\cos(K\wedge) < 1$ 'dir.

Bu halde K ve $\psi_K(x)$ reeldir. Bu bölgede yayılan bir dalga vardır. Bu bölgeye izinli bölge denir.

ii) $\frac{1}{2}(A+D) > 1$ iken $\cos(K\wedge) > 1$ olacağından K kompleks olacaktır.

$K = \frac{m\pi}{\wedge} + iK_i$ olarak yazılır ve $(m = \mp\pi \mp 2\pi \mp \cdots\cdots)$ değerlerini alır. Buna göre dalga fonksiyonundaki e^{-iKx} ifadesini;

$e^{-iKx} = e^{i(m\pi/\wedge)x}.e^{(-|K_i|x)}$ şeklinde yazarız.

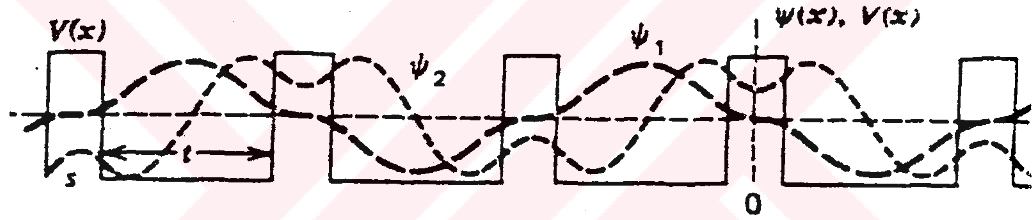
O halde bu bölgede $\psi_K(x)$ sönümlenen bir fonksiyondur. Geniş bir kristal içerisinde değeri sıfırdır. Bu $\cos(K\wedge) > 1$ olduğu bölgelere yasaklanmış band bölgeleri deriz. Geniş bir kristal içerisinde bu bölgelerde varolabilecek enerji seviyelerinde elektron bulunmaz.

iii) *Şimdi* $K\Lambda = m\pi$ *sınır noktasına bakalım:*

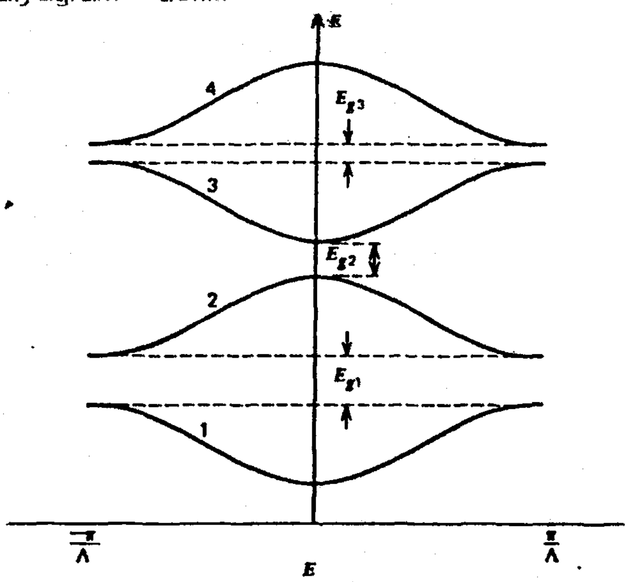
Birim hücre içerisinde bu noktada dalga fonksiyonu $\psi_K(x)$'in yansıması *(tam) ile* $2K\Lambda = m\pi$ *olacaktır.*

Yani bu sınır bölgesinde $\psi_K(x)$ dalga fonksiyonu kristal içerisinde tünelleme yapamaz ve tam yansımaya uğrar. Böylece burada ilerleyen dalgadan çok bir duran dalga deseni oluşur. $K = m\pi/\Lambda$'nın aynı değerine karşılık tek ve çift olmak üzere iki dalga fonksiyonu (duran dalga) vardır. *Bunlardan birinin maksimum noktası bariyerdedir. Onun* E_2 *enerjisi, oluşan diğer* $\psi_1(x)$ *dalga fonksiyonunun* E_1 *enerjisinden büyüktür. İkinci fonksiyonun nodları bariyerdedir.*

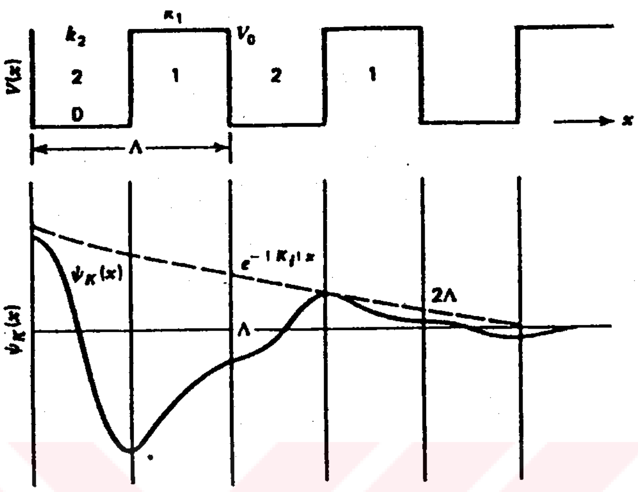
Sonuçta böyle $K = m\pi/\Lambda$ 'da K'nın aynı değerine karşılık iki elektronik dalga fonksiyonu ve iki enerji bulunur.



$-\pi \langle K\Lambda \langle \pi$ bölgesine birinci Brillouin bölgesi denir. İki bölge halindeki $\pi \langle K\Lambda \langle 2\pi$ ve $-2\pi \langle K\Lambda \langle -\pi$ bölgeleri ikinci Brillouin bölgesini oluşturur. Çizilen grafik sadece $-\pi/\Lambda \langle K \langle \pi/\Lambda$ sınırına taşınıyorsa buna " indirgenmiş bölge enerji band diyagramı " denir.



$\psi_K(x)$ dalga fonksiyonunu incelersek $K = \pi + iK_i$ yasak band aralığı bölgesinde $\psi_K(x)$ dalga fonksiyonunu çizecek olursak;



Buradan da görüldüğü gibi $\psi_K(x)$ exponansiyel olarak sönen bir fonksiyondur. Yani kuyular içerisinde bir sinüsoidal dalga hareketi bariyerlerde ise exponansiyel hareket yapmaktadır. $e^{-|K_i|x}$ zarf fonksiyonu olarak bilinir.

Şimdi genel matris gösterimine geri dönelim;

$$\begin{vmatrix} A - e^{-iK\Lambda} & B \\ C & D - e^{-iK\Lambda} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} A_n \\ B_n \end{vmatrix} = 0$$

Burada;

$$B_n \, \alpha \, -N(A - e^{-iK\Lambda}) \text{ ve } A_n \, \alpha \, NB \text{ 'dir.} \qquad (4\text{-}2\text{-}39)$$

$$N\{C.B - (A - e^{-iK\Lambda})(D - e^{-iK\Lambda})\} = 0 \qquad (4\text{-}2\text{-}40)$$

$N \neq 0$ olduğuna göre $B.C - (A - e^{-iK\Lambda}).(D - e^{-iK\Lambda}) = 0$ olmalıdır. Buna göre;

$$\begin{vmatrix} A_n \\ B_n \end{vmatrix} = N. \begin{vmatrix} B \\ e^{-iK_{1,2}\Lambda} - A \end{vmatrix} \qquad (4\text{-}2\text{-}41)$$

şeklinde yazılabilir.

$\tilde{a}_0 = \sum \tilde{a}_1$, $\tilde{a}_1 = \sum \tilde{a}_2$ olduğuna göre $\tilde{a}_n = \sum \tilde{a}_{n+1}$ 'dir.

O halde, $\tilde{a}_o = \sum_{n=0}^{n} \tilde{a}_n$ olacaktır. Bu, $\tilde{a}_o = e^{(-iK\wedge)n}.\tilde{a}_n$ şeklinde yazılabilir ve $\tilde{a}_n = e^{iKn\wedge}.\tilde{a}_o$ biçiminde genel bir yazılım oluşturulabilir. Bunları gözönünde bulundurarak ve Denk.(4-2-41)'i kullanarak kuyu için dalga fonksiyonunu yeniden yazarız.

$$\psi_k(x) = N.\{B.\mathrm{AiryAi}[Z_k(-b)] + (e^{-iK\wedge} - A).\mathrm{AiryBi}[Z_k(-b)]\}.e^{iKn\wedge} \tag{4-2-42}$$

şeklinde elde edilir. Bu denklemi e^{-iKx} ve e^{iKx} ile çarpalım;

$$\psi_k(x) = N.\{B.\mathrm{AiryAi}[Z_k(-b)] + (e^{-iK\wedge} - A).\mathrm{AiryBi}[Z_k(-b)].e^{-iK(x-n\wedge)}\}.e^{iKx} \tag{4-2-43}$$

olacaktır. Genel Bloch denklemini hatırlarsak;

$\psi(x) = \psi(x+\wedge).e^{iKx}$ şeklinde idi. Burada $\psi_K(x)$'nın ilk bölümü olan;

$$N.\{B.\mathrm{AiryAi}[Z_k(-b)] + (e^{-iK\wedge} - A).\mathrm{AiryBi}[Z_k(-b)].e^{-iK(x-n\wedge)}\} \tag{4-2-44}$$

kuyu için dalga denkleminin periyodik bölümüdür.

Aynı yöntemle bariyer dalga denklemini de Bloch formunda elde edebiliriz.

$$\psi_b(x) = N.\left\{\begin{pmatrix}(k.B + \ell(e^{-iK\wedge} - A)).\mathrm{AiryAi}[Z_b(-b)] + \\ (m.B + n(e^{-iK\wedge} - A)).\mathrm{AiryBi}[Z_b(-b)]\end{pmatrix} e^{-iK(x-n\wedge)}\right\}.e^{iK\wedge} \tag{4-2-45}$$

Geçiş matrisleri yöntemini kullanarak elde ettiğimiz dalga fonksiyonları ve *enerji özdeğerleri bize sistemi tanımada yol gösterir.*

Çalışmamızda N=11 kuyu gözönüne alınarak F elektrik alanının (1,10,100,1000,10.000) *Volt/cm değerlerine karşılık herbir kuyunun enerji* özdeğerleri hesaplanmış ve E enerjisinin F elektrik alanına göre değişimleri çizilmiştir. Bu grafikler, büyük F elektrik alan değerlerinde ladder yapısının çok iyi göründüğünü fakat F elektrik alan değeri küçüldükçe ladder yapısının bozulduğunu gösterir.

4-3 SIKI BAĞLANMA YAKLAŞIMI İLE ENERJİ ÖZDEĞERLERİNİN BULUNMASI

$C_{n,p}$ katsayıları için yazdığımız master denklemini (Denk.(3-2-25)) yeniden yazalım;

$$\sum_{n,p} \delta_{n,n'} \left\{ \varepsilon_Q \, \delta_{p',p} - \left(\varepsilon(F;n,p',p) + p(e\,F\,a)\delta_{p',p} \right) \right\} c^Q_{n,p} = 0 \qquad (4\text{-}3\text{-}1)$$

Bu denklemde;

$$\varepsilon(F;n,p',p) = \varepsilon(F;n,k)\frac{1}{N}\sum_k e^{ik\wedge(p-p')} \qquad (4\text{-}3\text{-}2)$$

olarak tanımlanmıştı. Bu bölümde sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak;

$$\varepsilon(F;n,k) = \bar{\varepsilon}(F;n) + \frac{\Delta\bar{\varepsilon}(F;n)}{2}\cos(K\wedge) \qquad (4\text{-}3\text{-}3)$$

biçiminde tanımlanır. Burada $\bar{\varepsilon}(F;n)$ *ortalama band enerjisi,* $\frac{\Delta\bar{\varepsilon}(F;n)}{2}\cos(K\wedge)$ ise ortalama yarıband genişliğidir.

Burada $\cos(K\wedge) = \mp 1$ değerlerini kullanarak bandların alt ve üst sınır enerjilerini bulabiliriz.

Denk.(4-3-1)'ü Denk.(4-3-2)'de yerine yerleştirelim;

$$\varepsilon(F;n,p',p) = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik\wedge(p'-p)}.\left\{\bar{\varepsilon}(F;n) + \frac{\Delta\bar{\varepsilon}(F;n)}{2}\cos(K\wedge)\right\} \qquad (4\text{-}3\text{-}4)$$

$$\varepsilon(F;n,p',p) = \bar{\varepsilon}_n(F)\delta_{p',p} + \frac{\Delta\bar{\varepsilon}_n(F)}{4}\left\{\frac{1}{N}\sum_k e^{ik\wedge(p'-p+1)} + \frac{1}{N}\sum_k e^{ik\wedge(p'-p-1)}\right\}$$

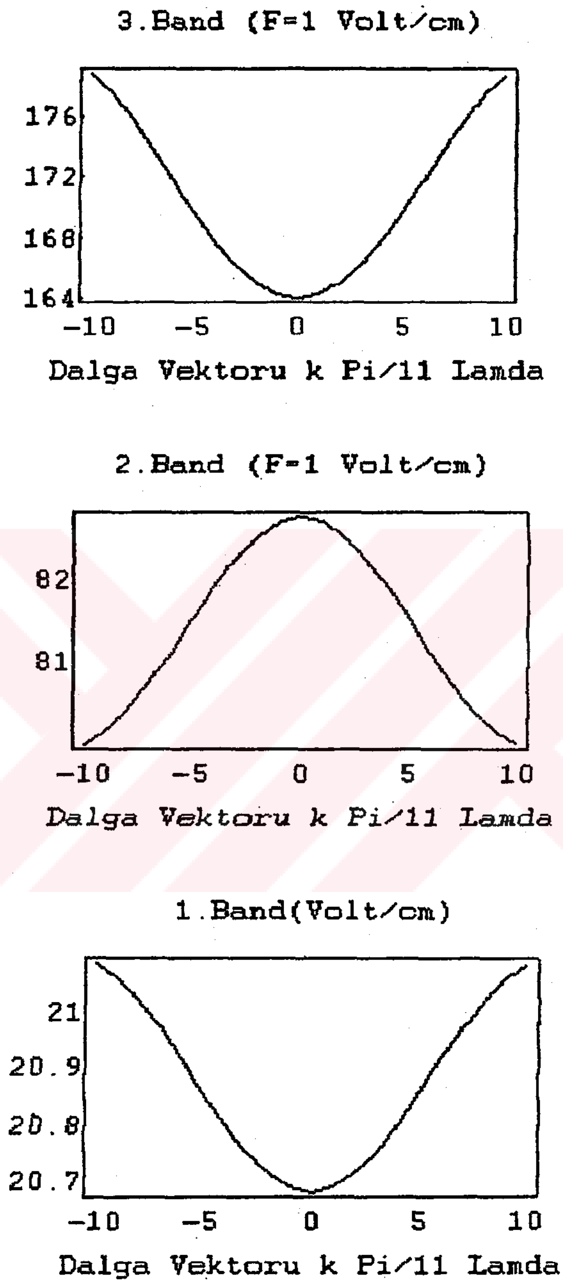
(4-3-5)

$$\varepsilon(F;n,p',p) = \bar{\varepsilon}_n(F)\delta_{p',p} + \frac{\Delta\bar{\varepsilon}_n(F)}{4}\left\{\delta_{p',p-1} + \delta_{p',p+1}\right\} \qquad (4\text{-}3\text{-}6)$$

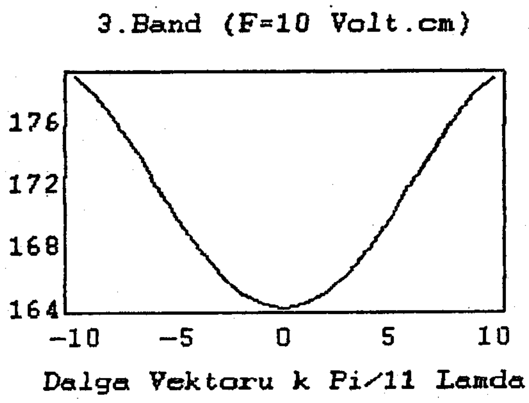
olarak elde edilir. Denk.(4-1-1) master denkleminde Denk.(4-1-6) eşitliğinin değerini yerine yerleştirerek F elektrik alan değerleri için bandın enerji değerleri bulunabilir.

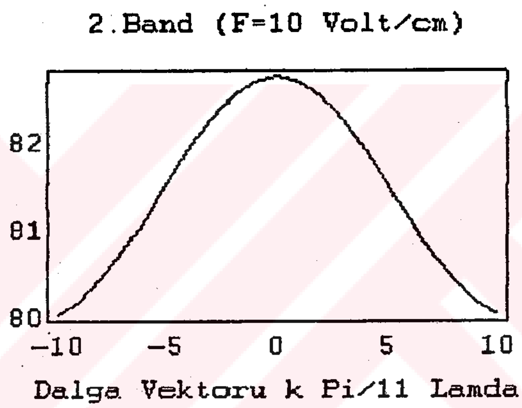
Çalışmamızda F elektrik alanının (1,10,100,1000,10.000) Volt/cm değerleri için bu band enerjileri bulunmuş ve E enerjisinin F elektrik alanına göre değişim grafikleri elde edilmiştir.

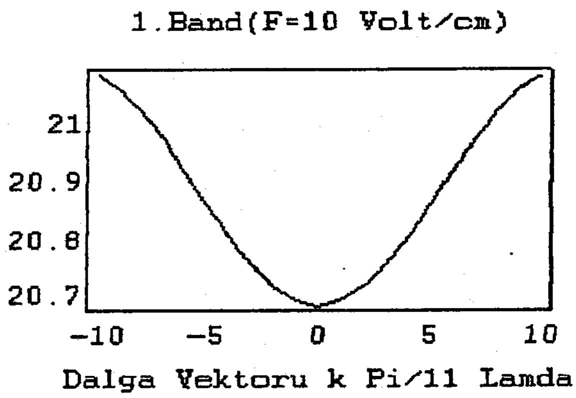
Bu yaklaşımla yapılan inceleme ve grafik çizimlerinin sonucu, Emin ve Hart'ın çalışma ilkesi ile bulunan sonuçlarla uyum içerisindedir. Yine F'in küçük değerlerinde ladder yapısı bulunmuyorken, F elektrik alanının büyük değerlerinde bu yapı açıkça görülmektedir. Bu çalışmada bu iki yöntemle elde edilen grafik ve sonuçlar karşılaştırılmıştır.



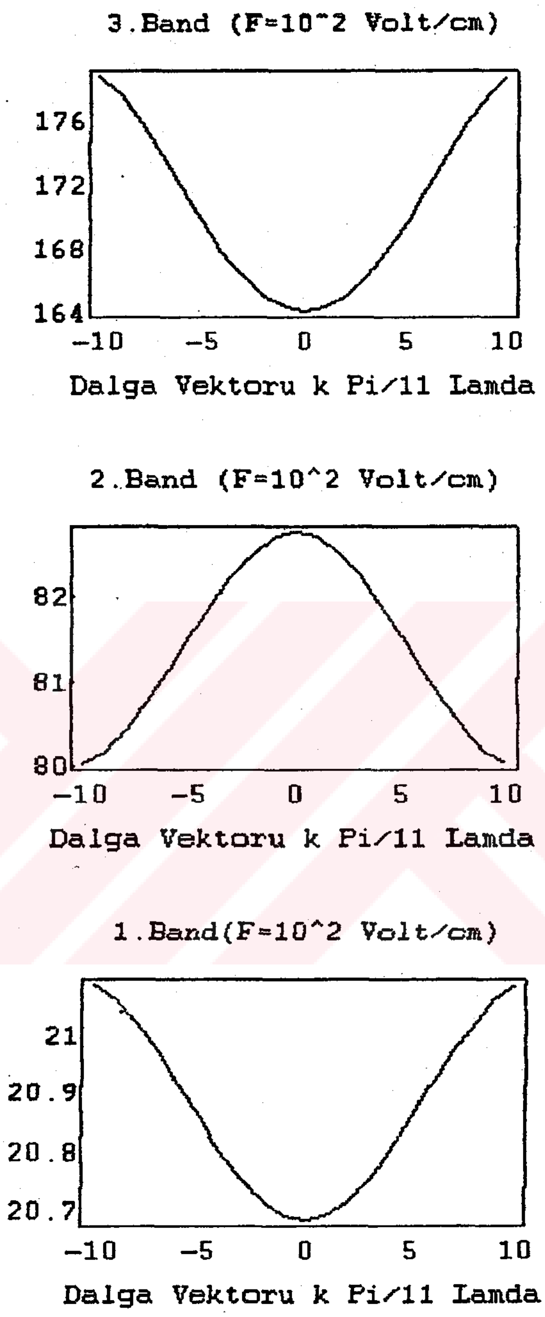
Şekil 1. F=1 Volt/cm için 1., 2., 3., bandların 1. Brillouin bölgesindeki enerji grafikleri.



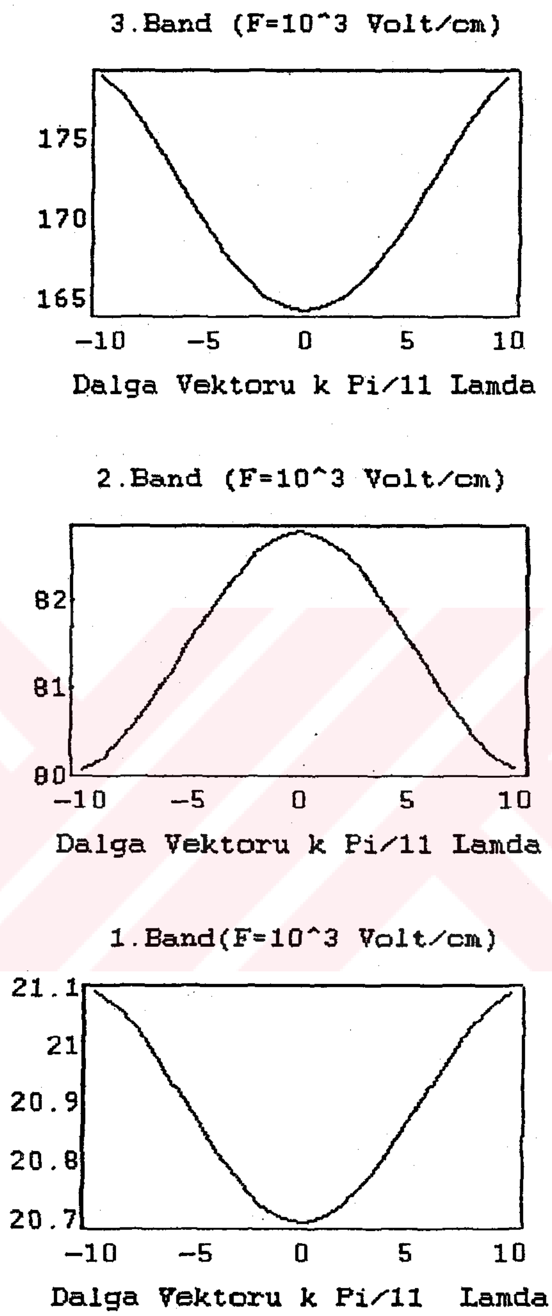




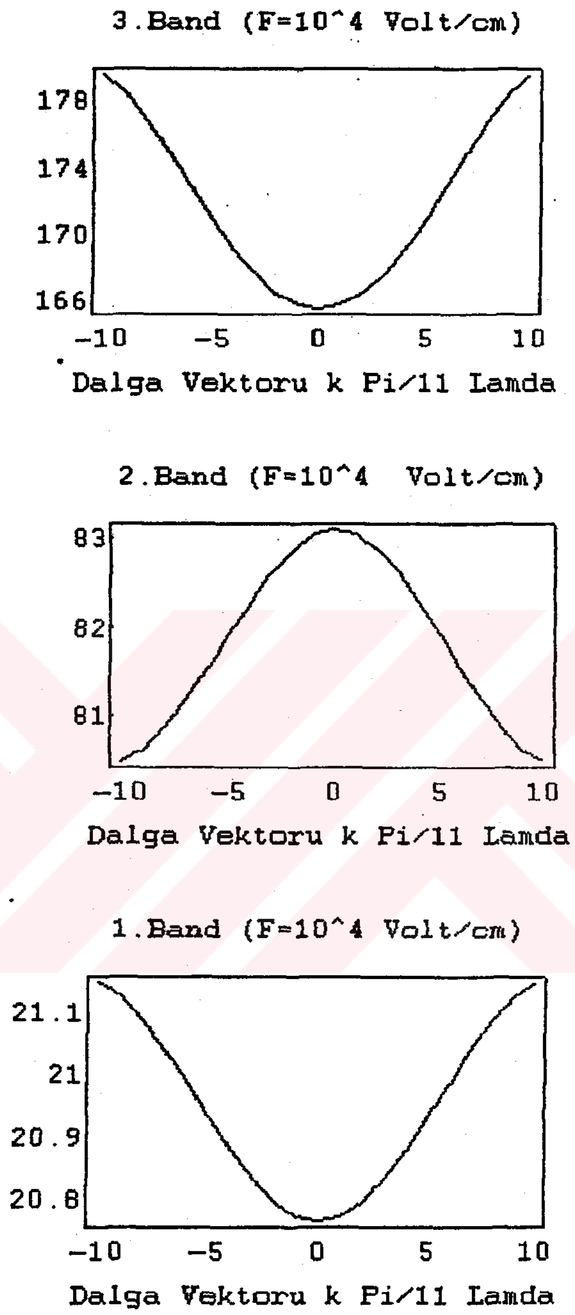
Şekil.2. F=10 Volt/cm için 1., 2., 3., bandların 1. Brillouin bölgesindeki enerji grafikleri.



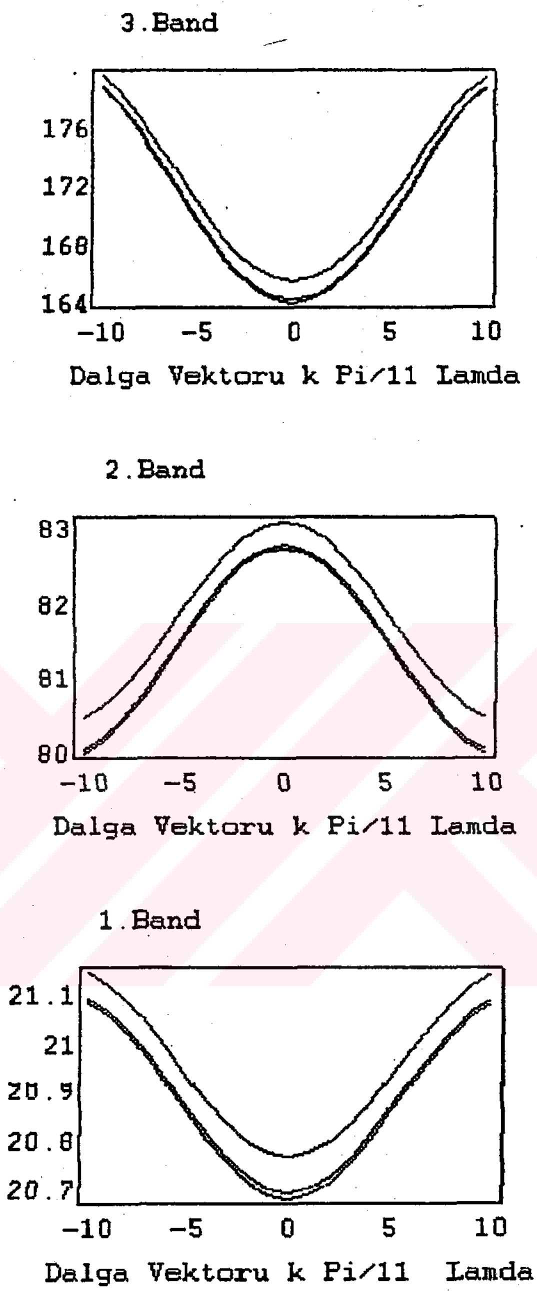
Şekil.3. F=100 Volt/cm için 1., 2., 3., bandların 1. Brillouin bölgesindeki enerji grafikleri.



Şekil.4. F=1000 Volt/cm için 1., 2., 3., bandların 1. Brillouin bölgesindeki enerji grafikleri.

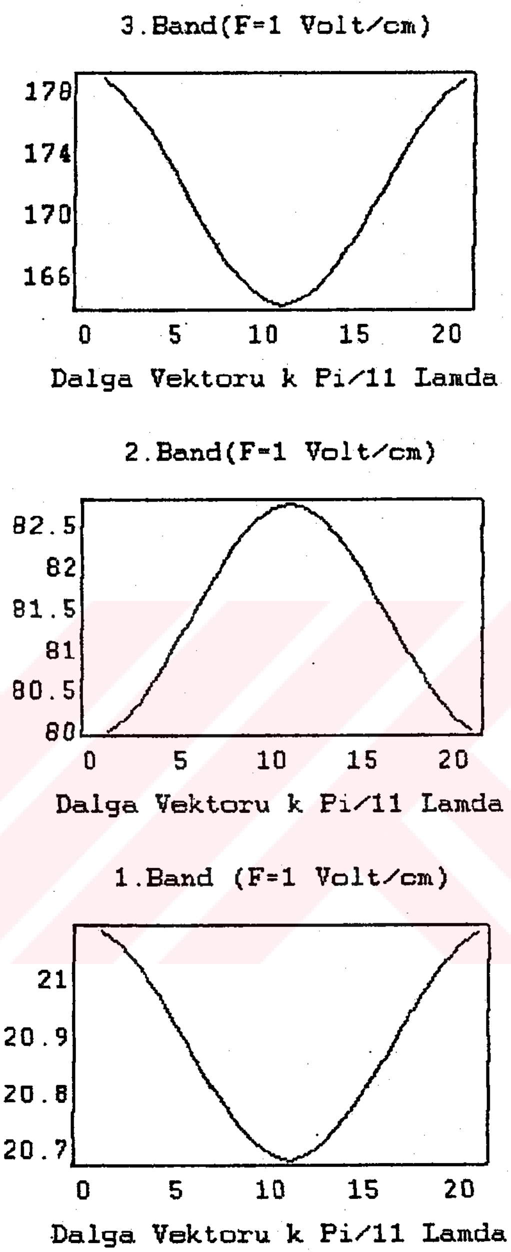


Şekil.5. F=10.000 Volt/cm için 1., 2., 3., bandların 1. Brillouin bölgesindeki enerji grafikleri

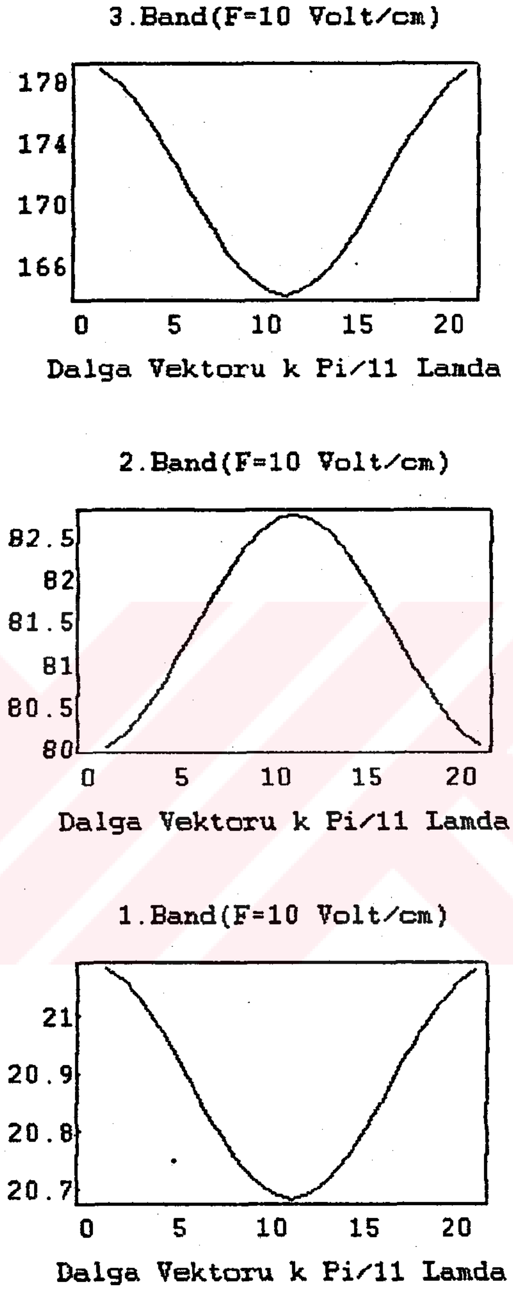


Şekil.6. F=(10^4, 10^3, 10) Volt/cm için 1.,2.,3. bandların indirgenmiş bölgedeki grafikleri.

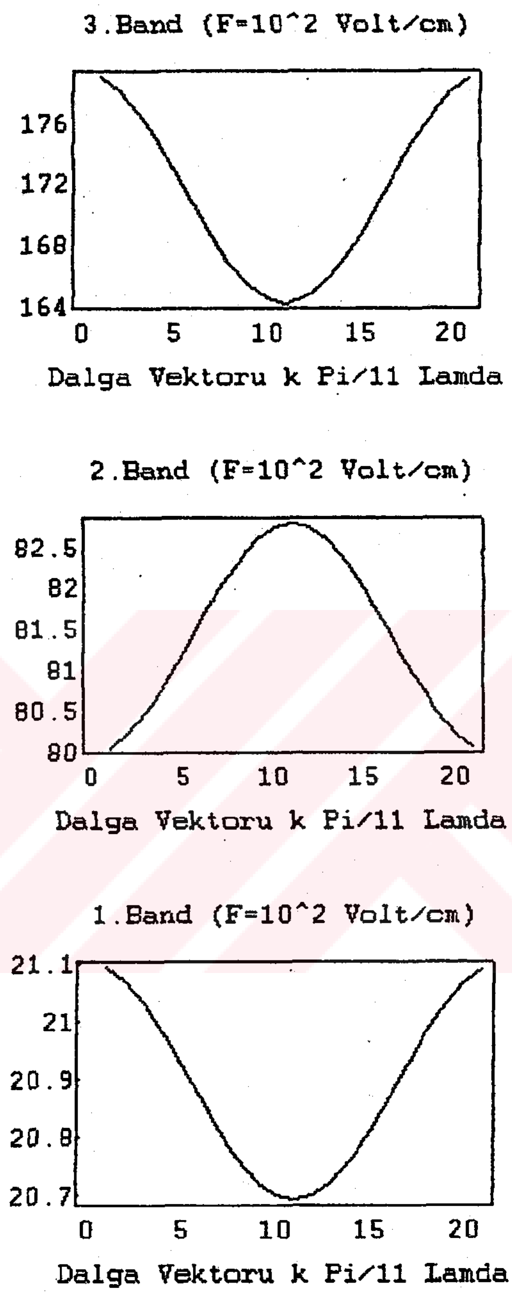
Bu grafiklerde F elektrik alanının belli değerleri için indirgenmiş bölgedeki 1.,2. ve 3. bandın band profili görülmektedir. Bu band profillerinin elektrik alanı altındaki birbirlerine göre değişimleri Şekil.6'da verilmiştir. Görülüyor ki, elektrik alan değeri büyüdükçe oluşan bandların enerjisi de artmaktadır ve bandlar daha büyük enerji durumlarına yerleşmektedir.



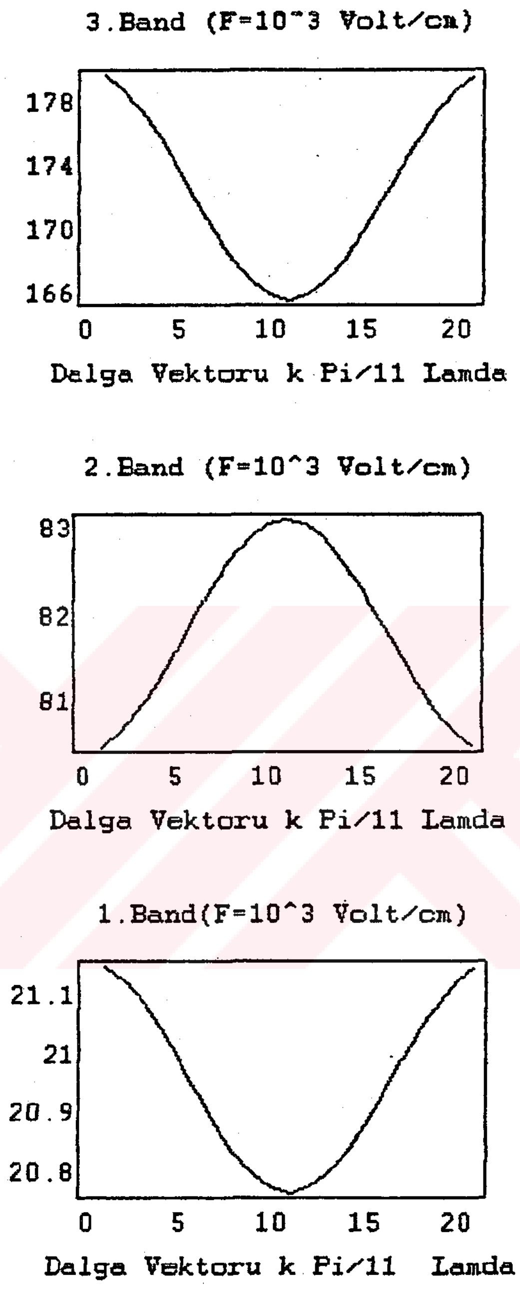
Şekil.7. Sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak F=1 Volt/cm için 1.,2.,3. bandların indirgenmiş bölgedeki grafikleri.



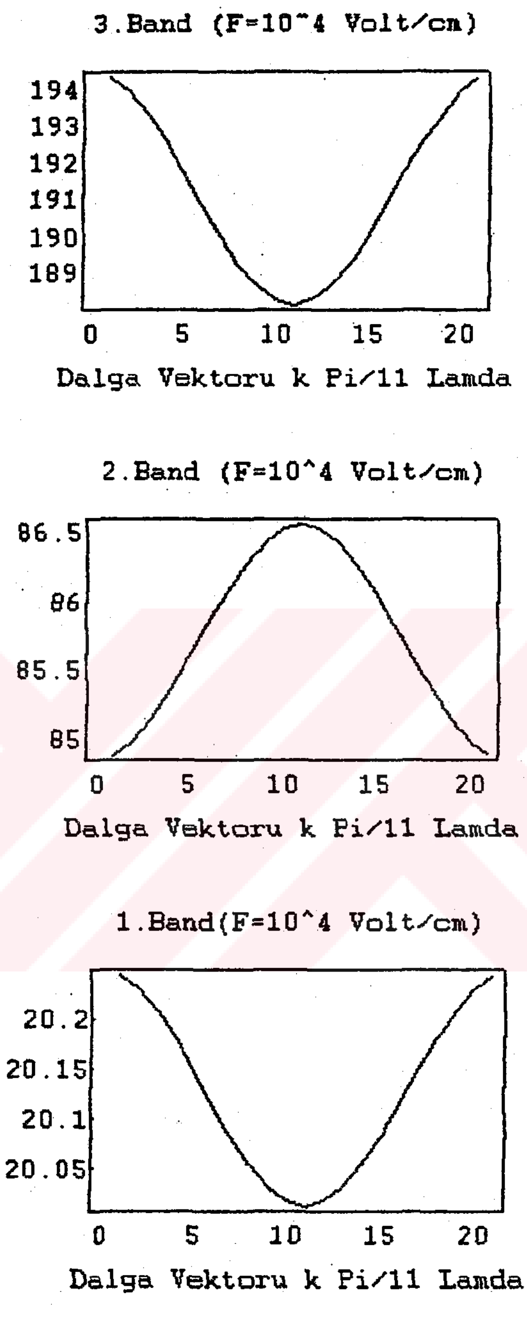
Şekil.8. Sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak F=10 Volt/cm için 1. ,2. ,3. bandların *indirgenmiş bölgedeki grafikleri.*



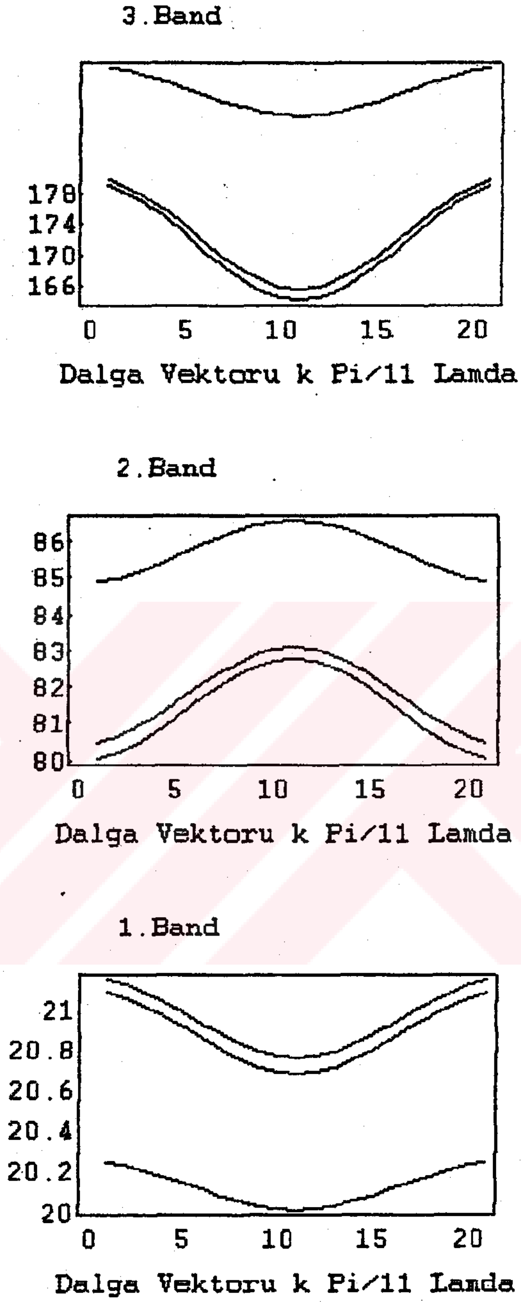
Şekil.9. Sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak F=10^2 Volt/cm için 1. ,2. ,3. bandların indirgenmiş bölgedeki grafikleri.



Şekil.10. Sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak F=10^3 Volt/cm için 1.,2.,3. bandların indirgenmiş bölgedeki grafikleri.

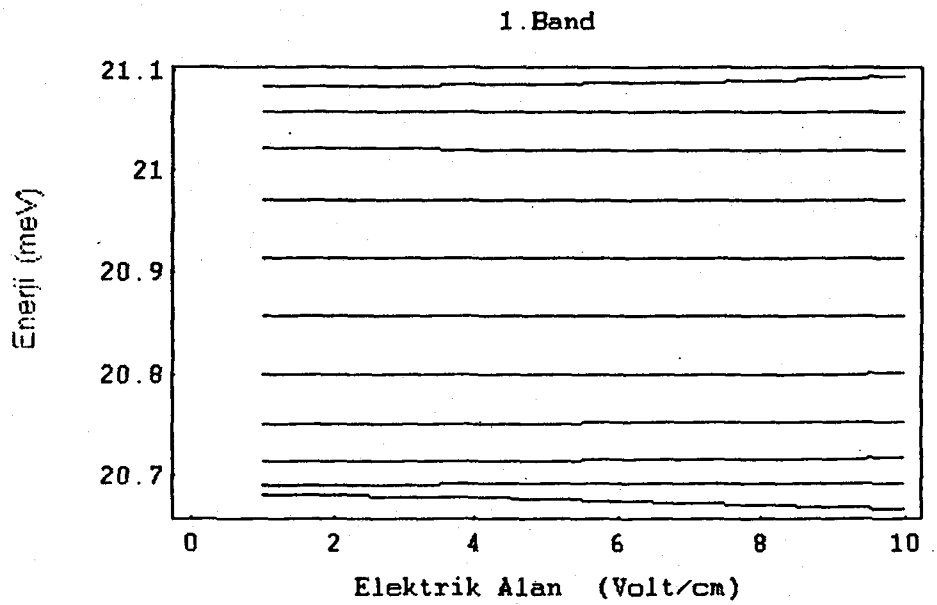


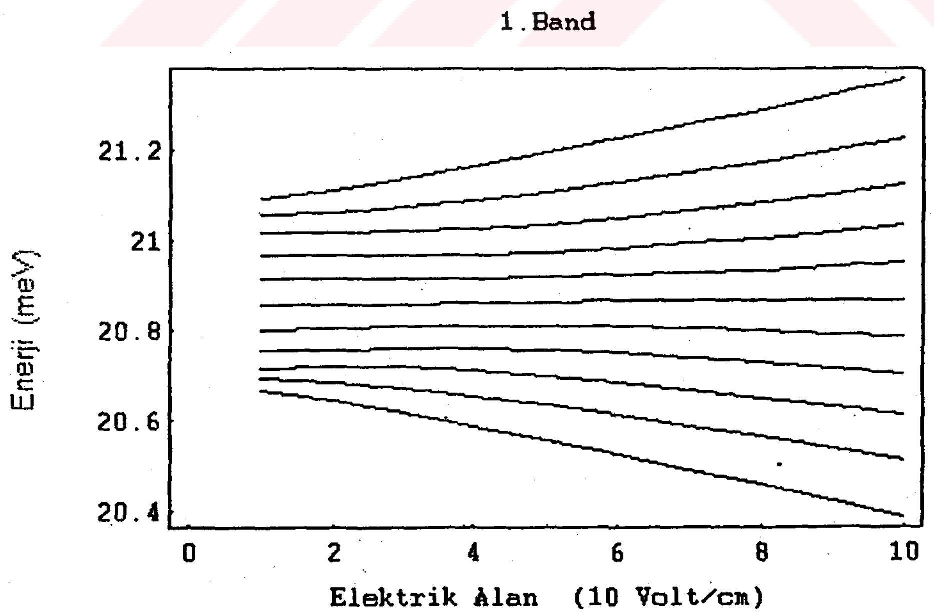
Şekil.11. Sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak F=10^4 Volt/cm için 1.,2.,3. bandların indirgenmiş bölgedeki grafikleri.



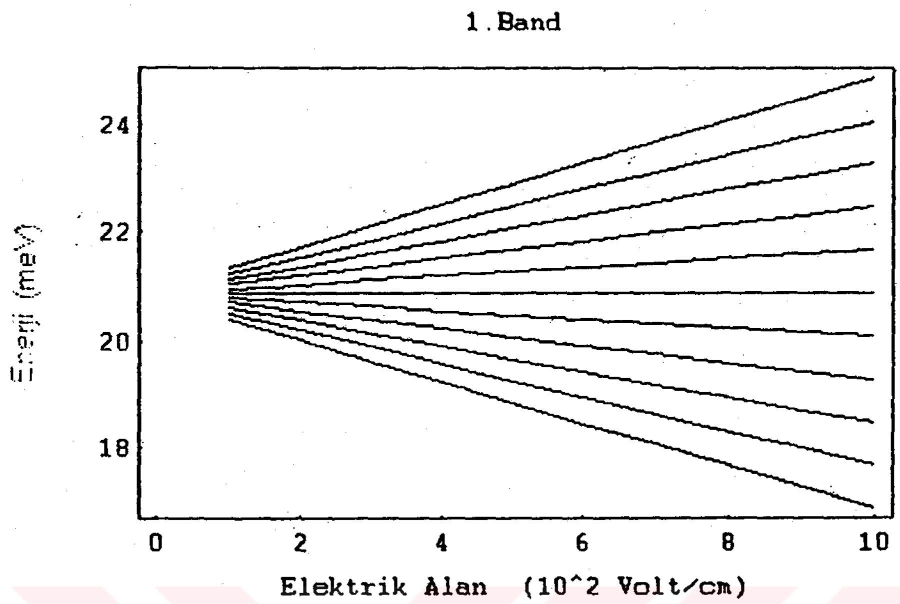
Şekil.12. Sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak F=(10^4,10^3 ve10) Volt/cm için 1.,2.,3. bandların indirgenmiş bölgedeki grafikleri.

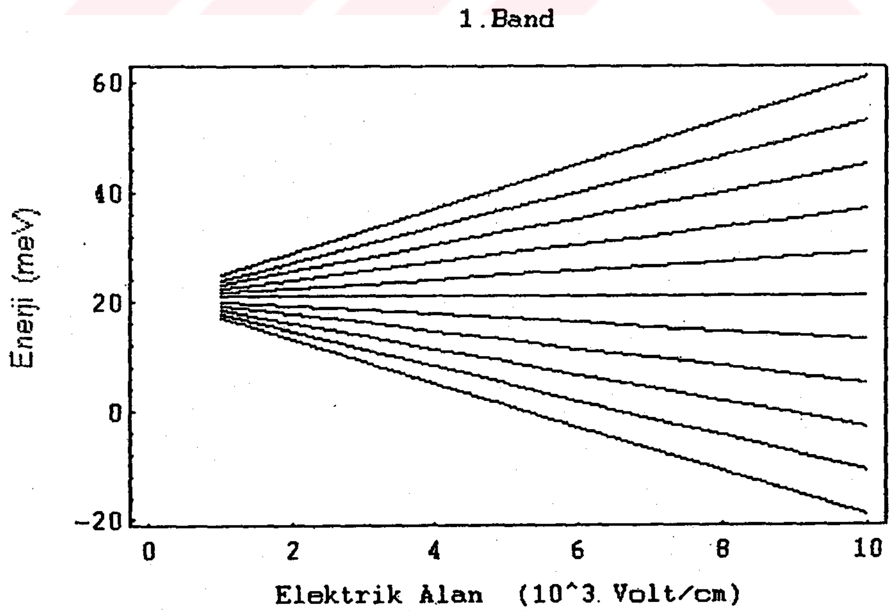
Belli F elektrik alan değerleri için sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak *indirgenmiş bölgede çizilen bandların profili görülmektedir.* Şekil.12.'de F=(10^4, 10^3 ve 10) Volt/cm için indirgenmiş bölgedeki bandların enerji durumları görülmektedir. Burada, sıkı bağlanma yaklaşımı ile indirgenmiş bölgede çizilen grafiğin alan altındaki profilinin, diğer yöntemle (periyodik potansiyel) aynı bölgede çizilen grafiğin band yapısından daha yakın olduğu görülmektedir.



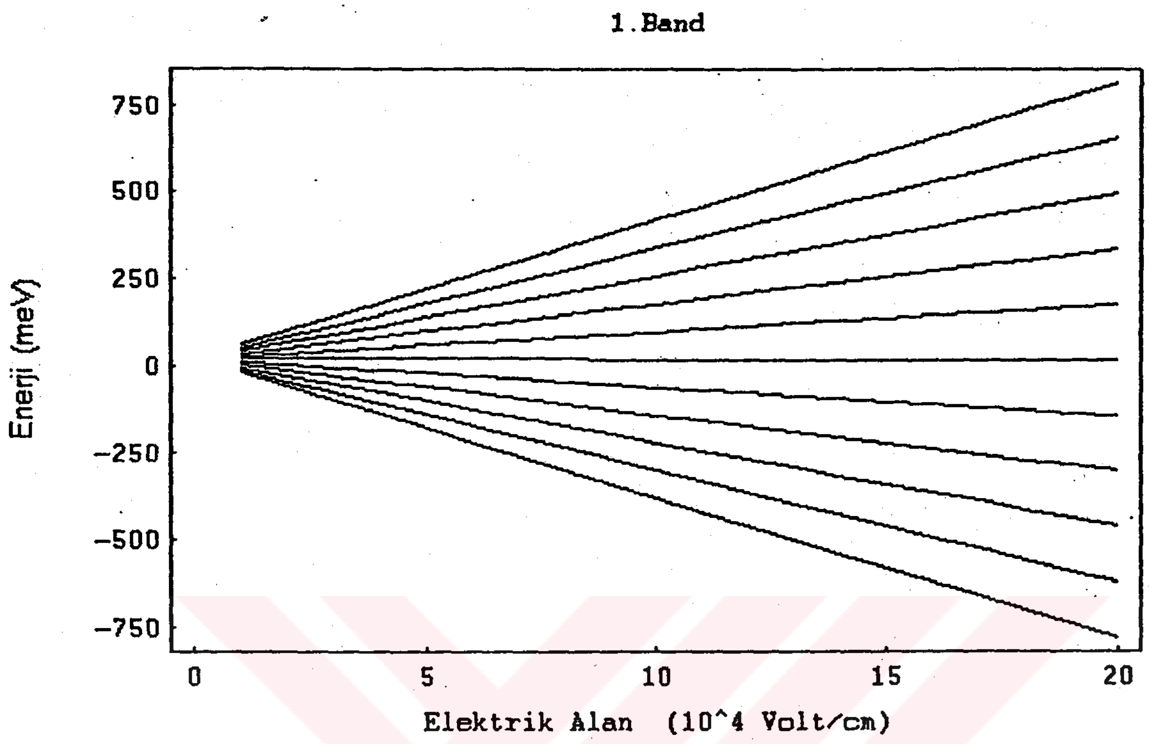


Şekil.13 1. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

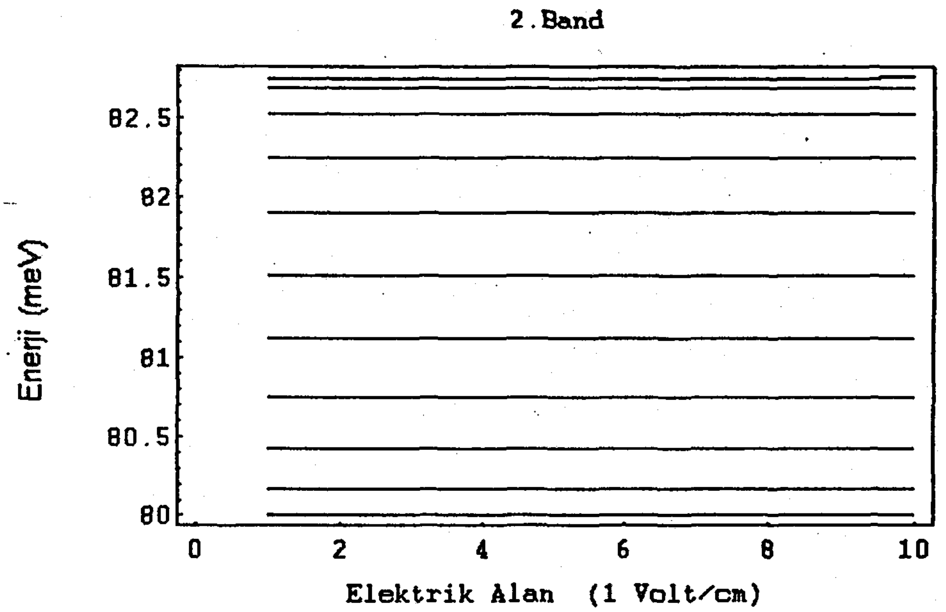


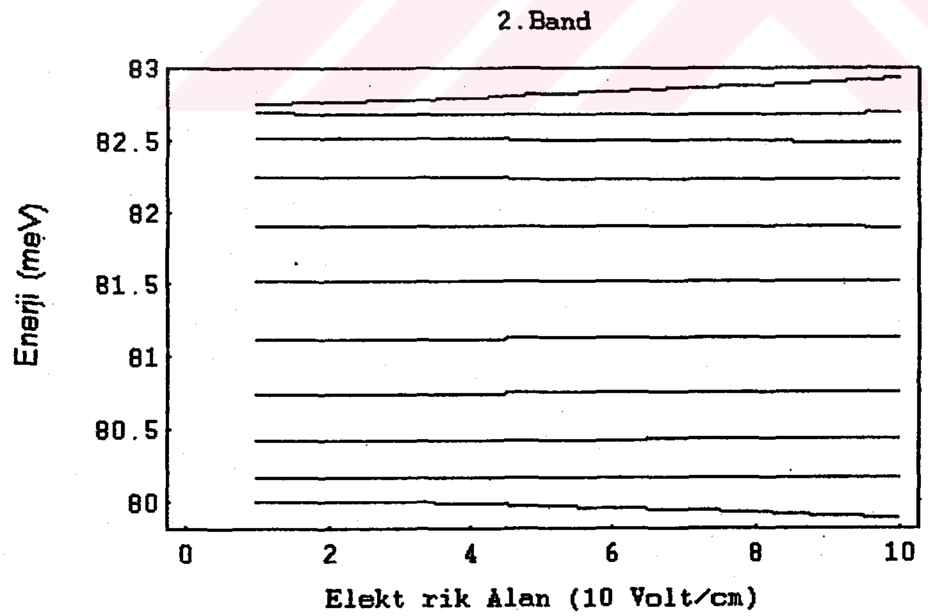


Şekil.14. 1. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

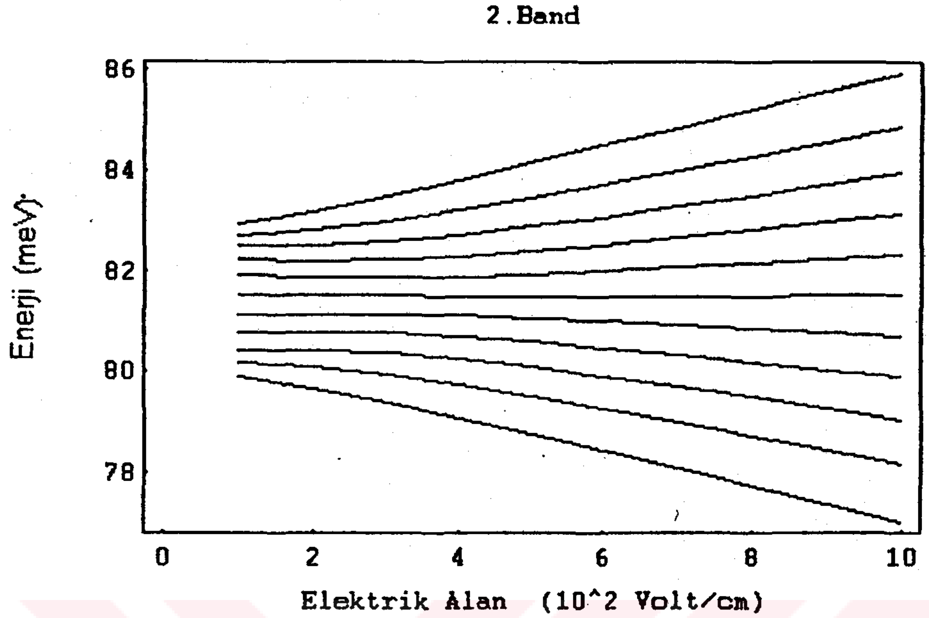


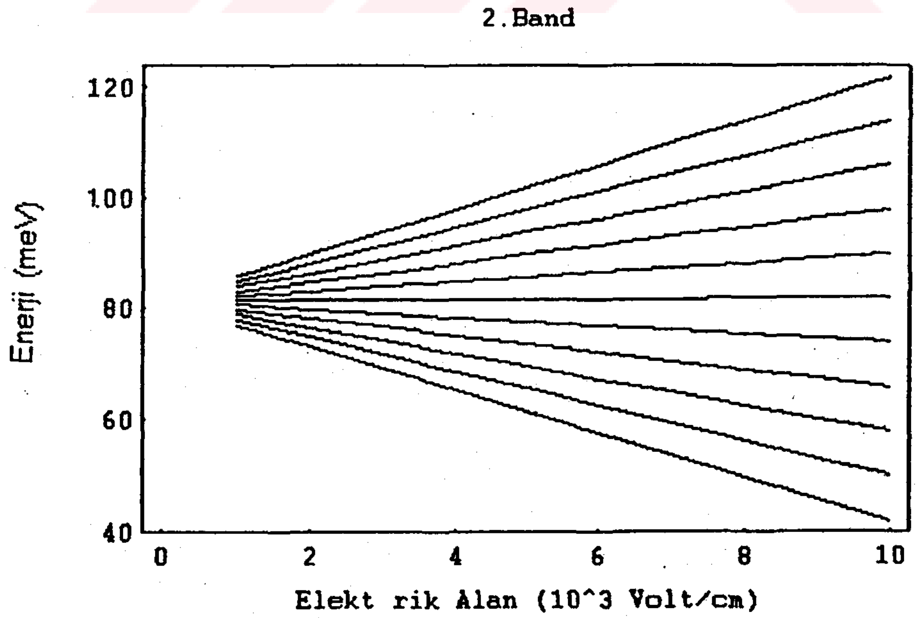
Şekil.15. 1. Bandın F=10.000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



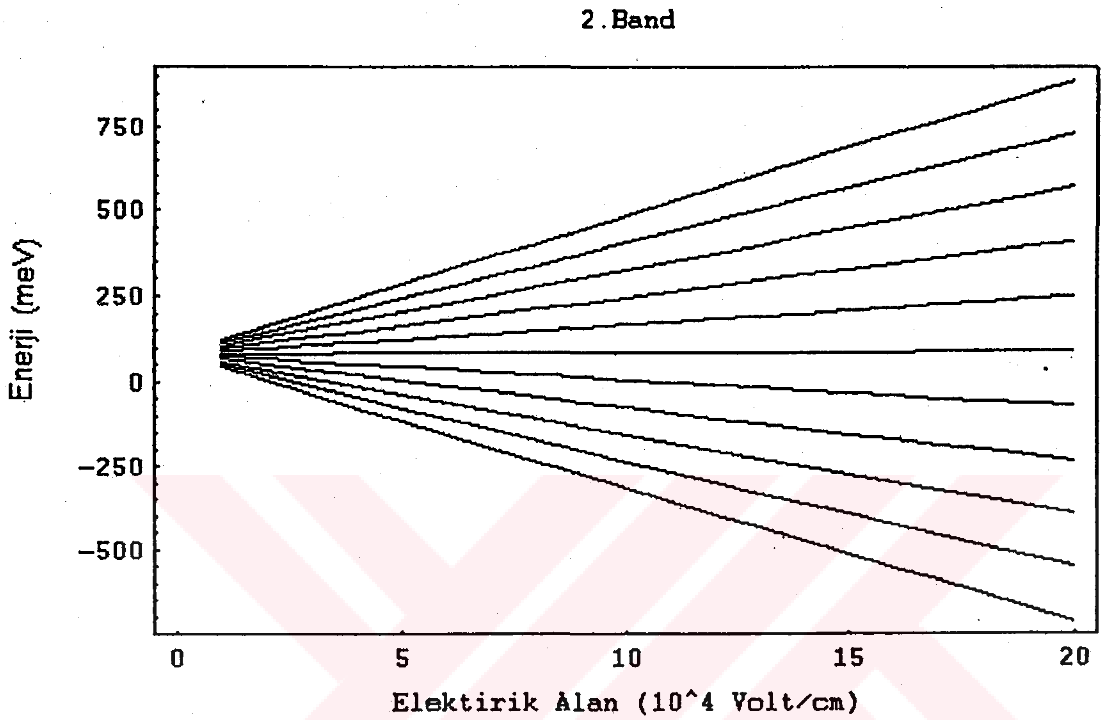


Şekil.16. 2. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

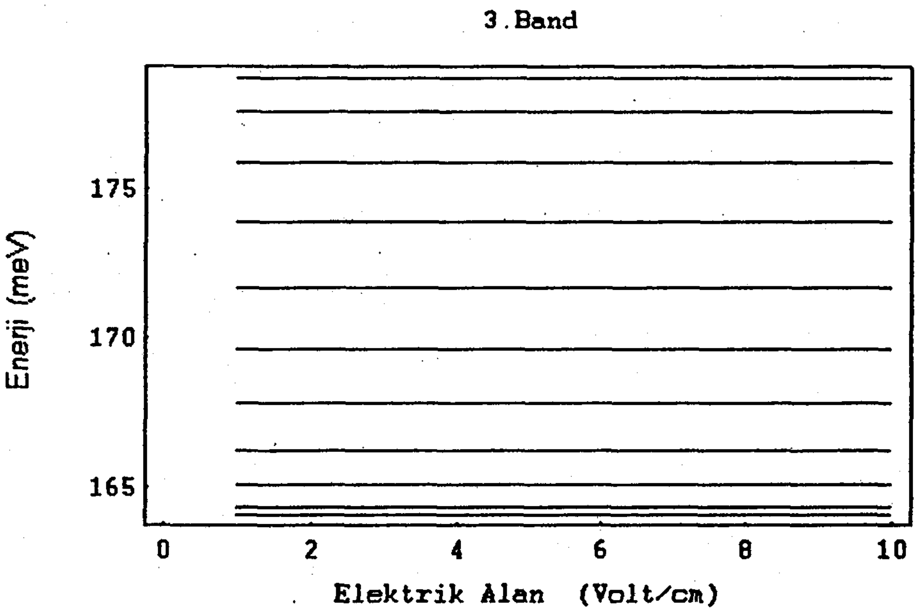


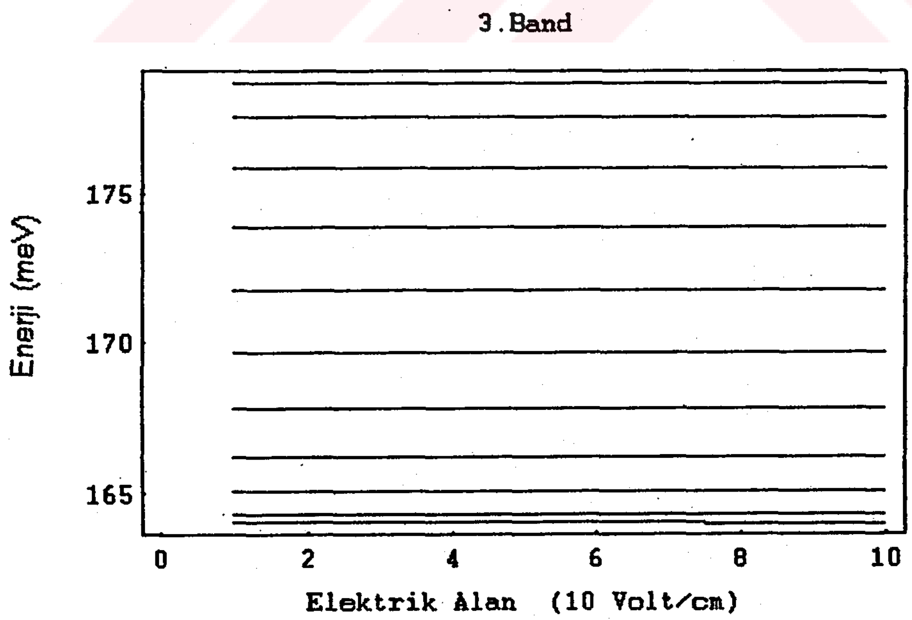


Şekil.17. 2. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

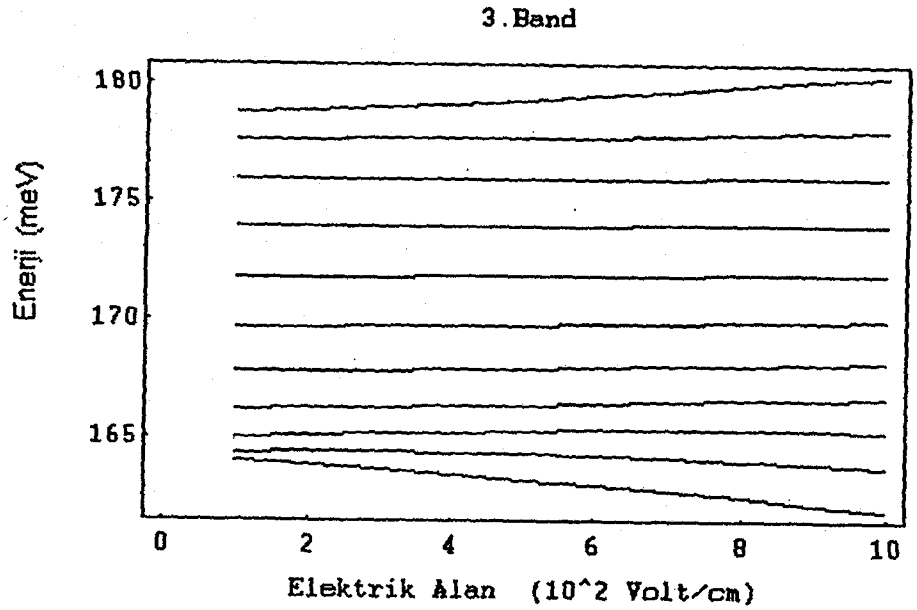


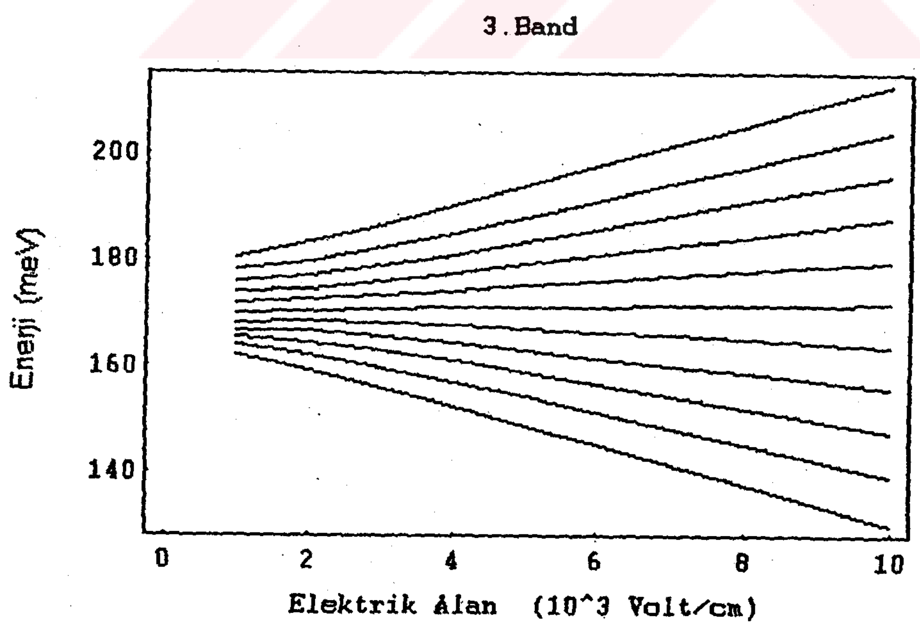
Şekil.18. 2. Bandın F=10.000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



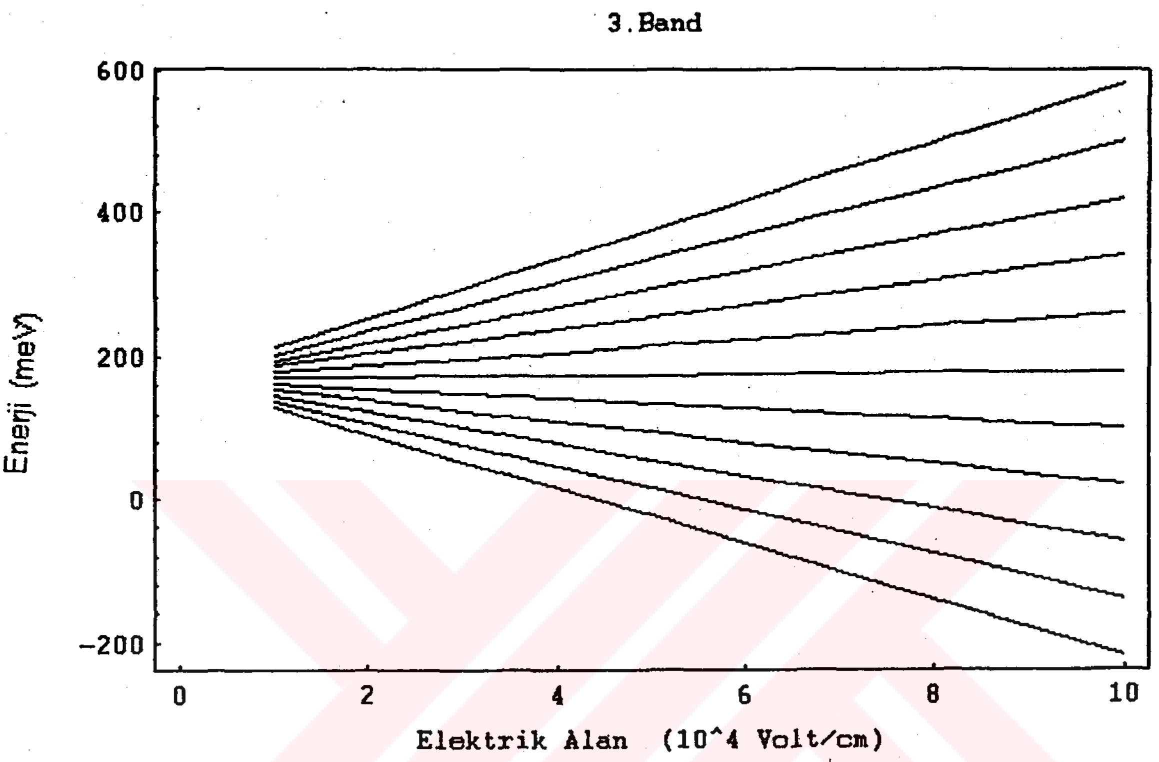


Şekil.19. 3. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana *göre Değişim Grafiği.*





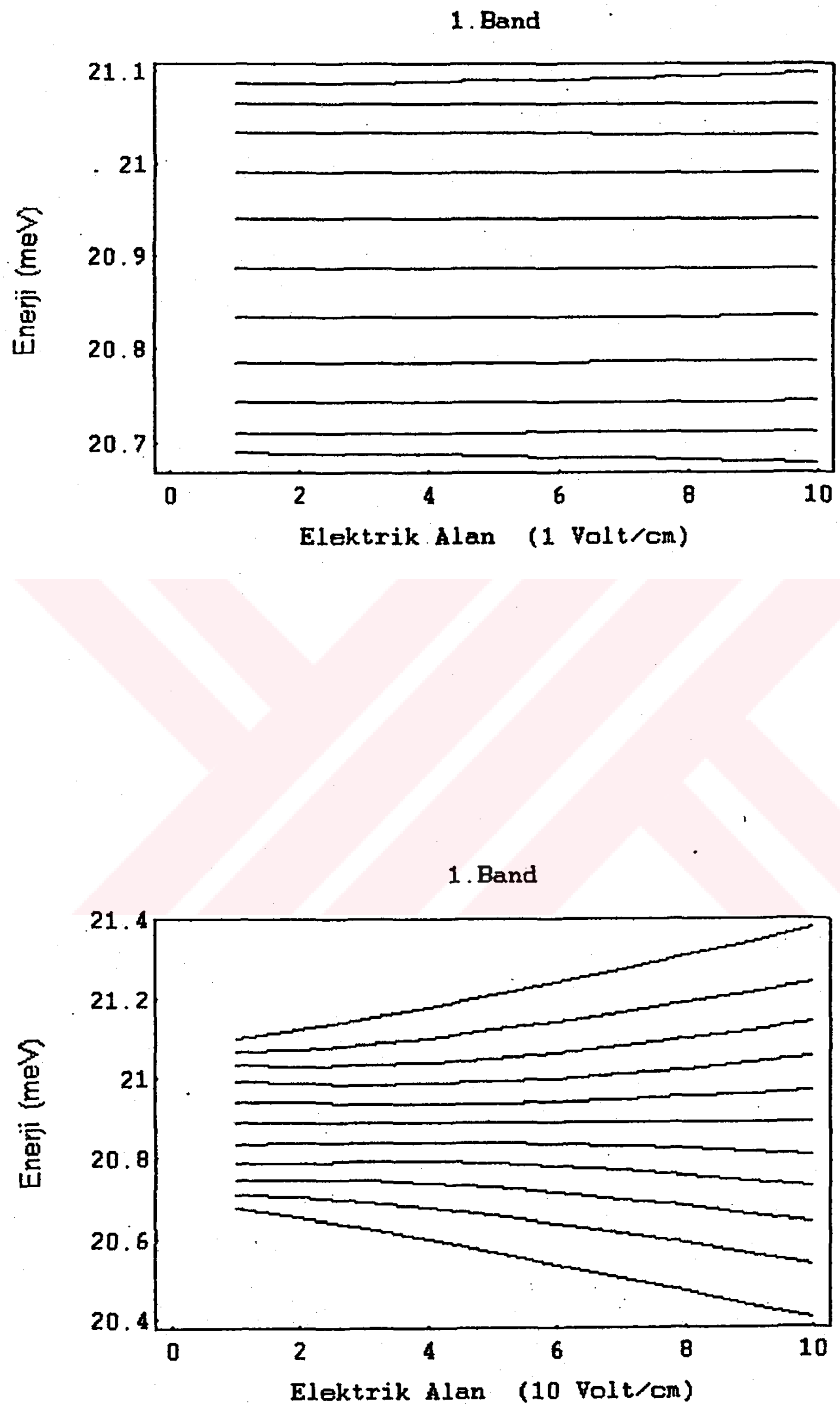
Şekil.20. 3. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



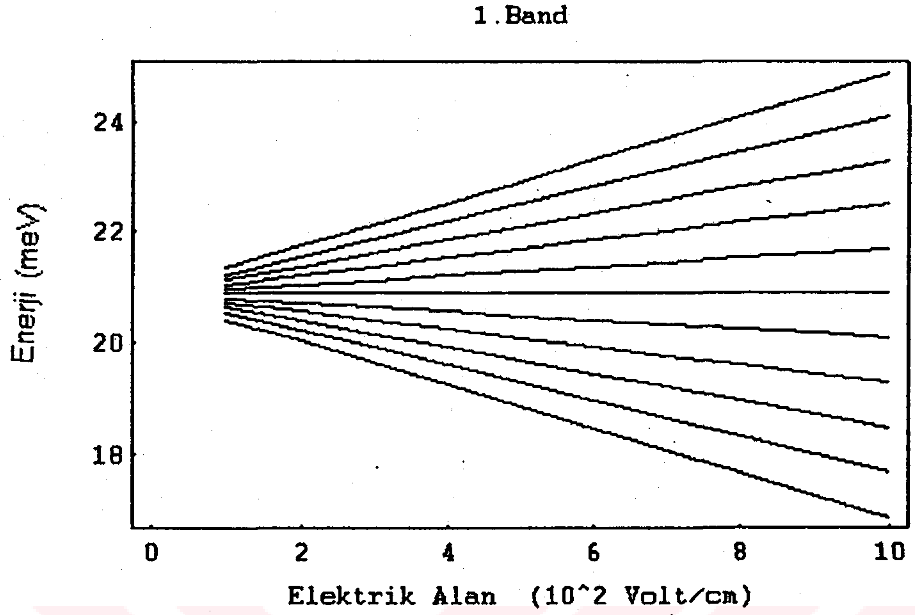
Şekil.21. 3. Bandın F=10.000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

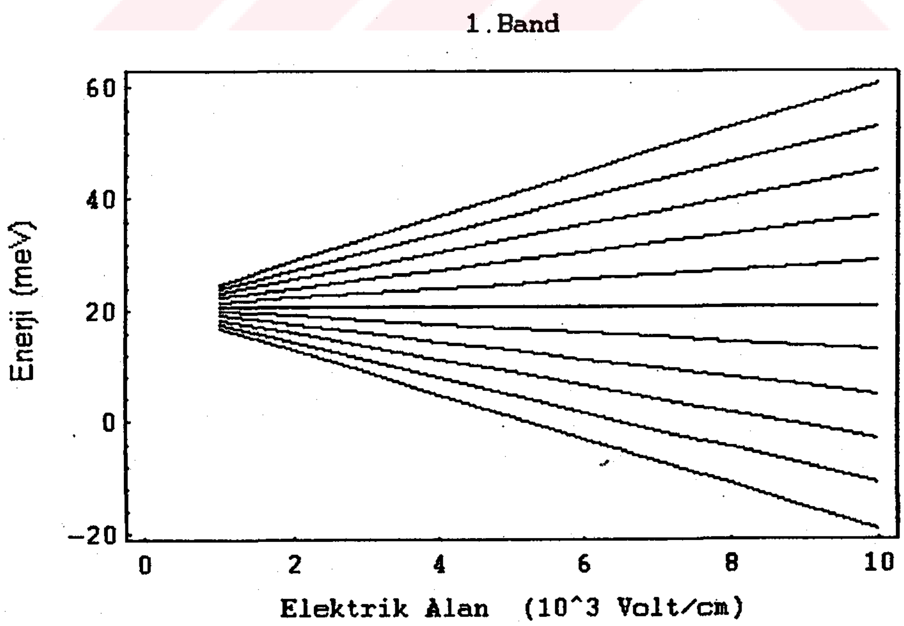
Şekil.13' den Şekil.21' e kadar elektrik alan değerlerine karşı E enerji *değişim grafikleri herbir band için ayrı ayrı çizilmiştir. 1. bandda ladder yapısı F=100 Volt/cm'de görülmeye başlarken, 2. bandda F=1000 Volt/cm'de görülür. 3.* bandda ise ladder yapısı ancak F=10.000 Volt/cm değerinde oluşur.

Bu, elektrik alanından etkilenerek ilk olarak ladder yapısı görülen bandın, tabana en yakın olan 1. band olduğunu gösterir. Diğer bandlarda ladder yapısının oluşturulabilmesi için daha büyük F elektrik alan değerine ihtiyaç vardır.

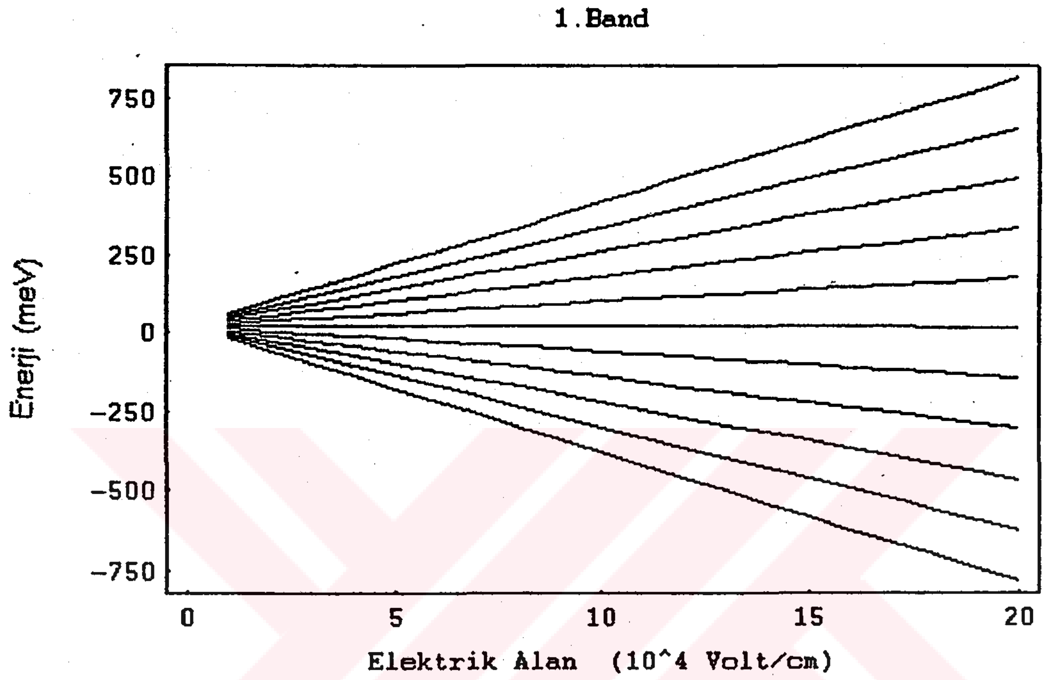


Şekil.22. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 1. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

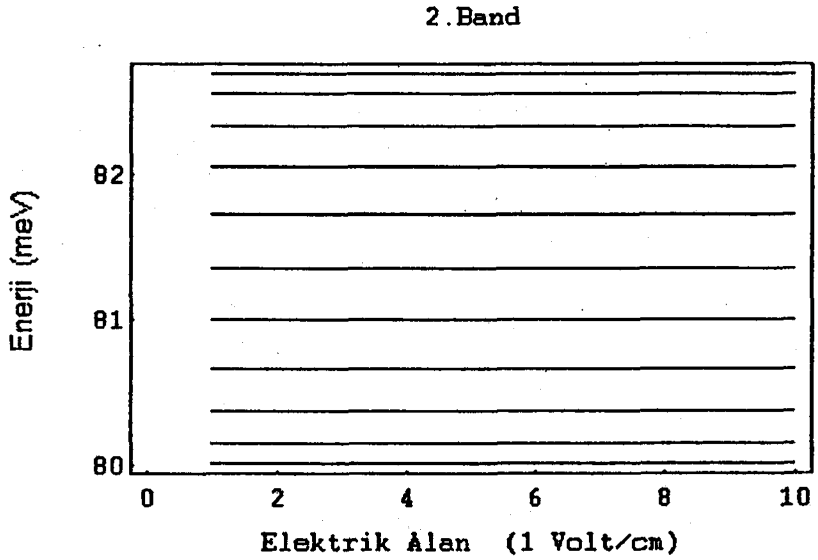


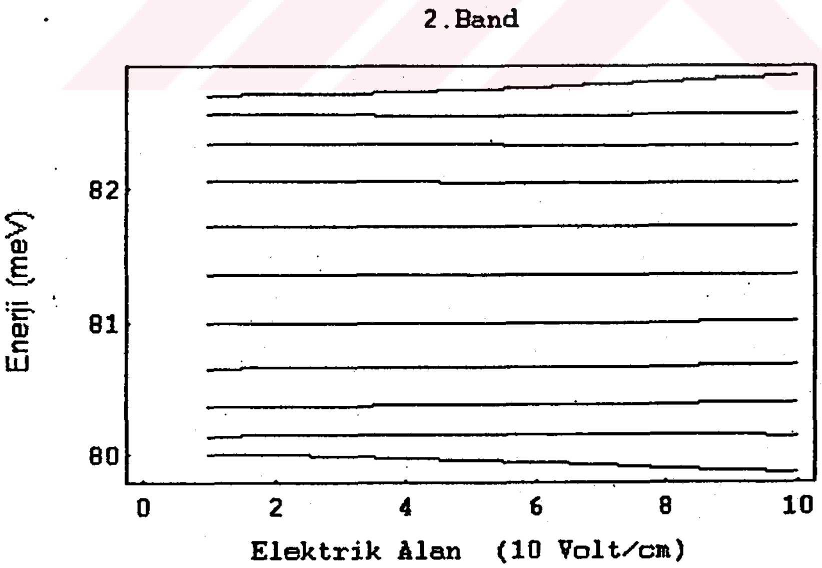


Şekil.23. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 1. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000Volt/cm *için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.*

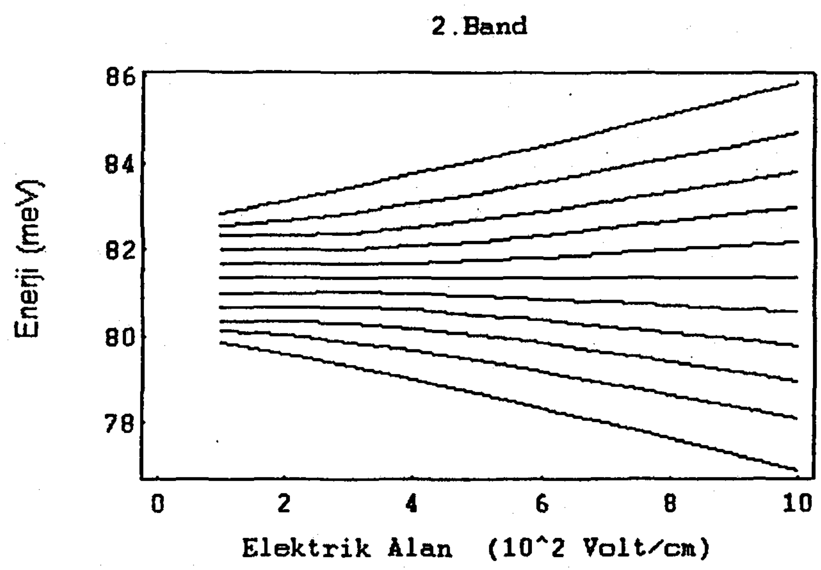


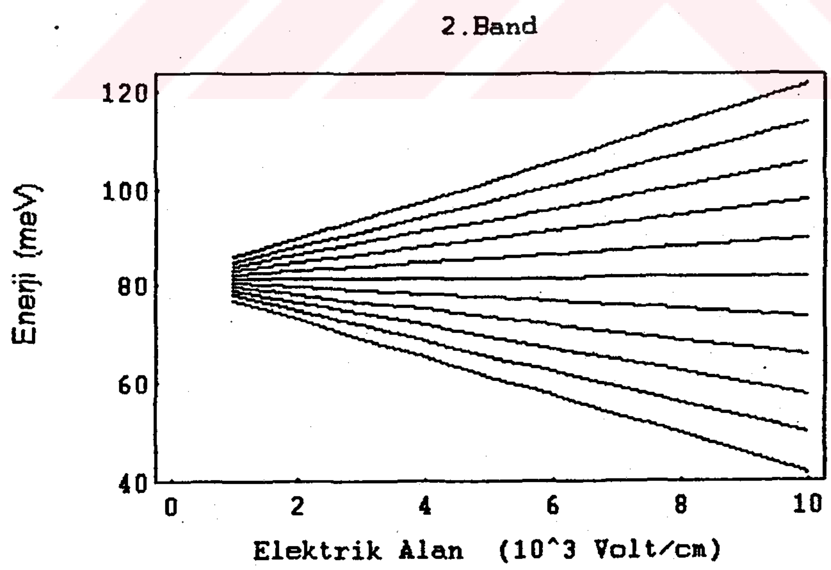
Şekil.24. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 1. Bandın F=10.000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



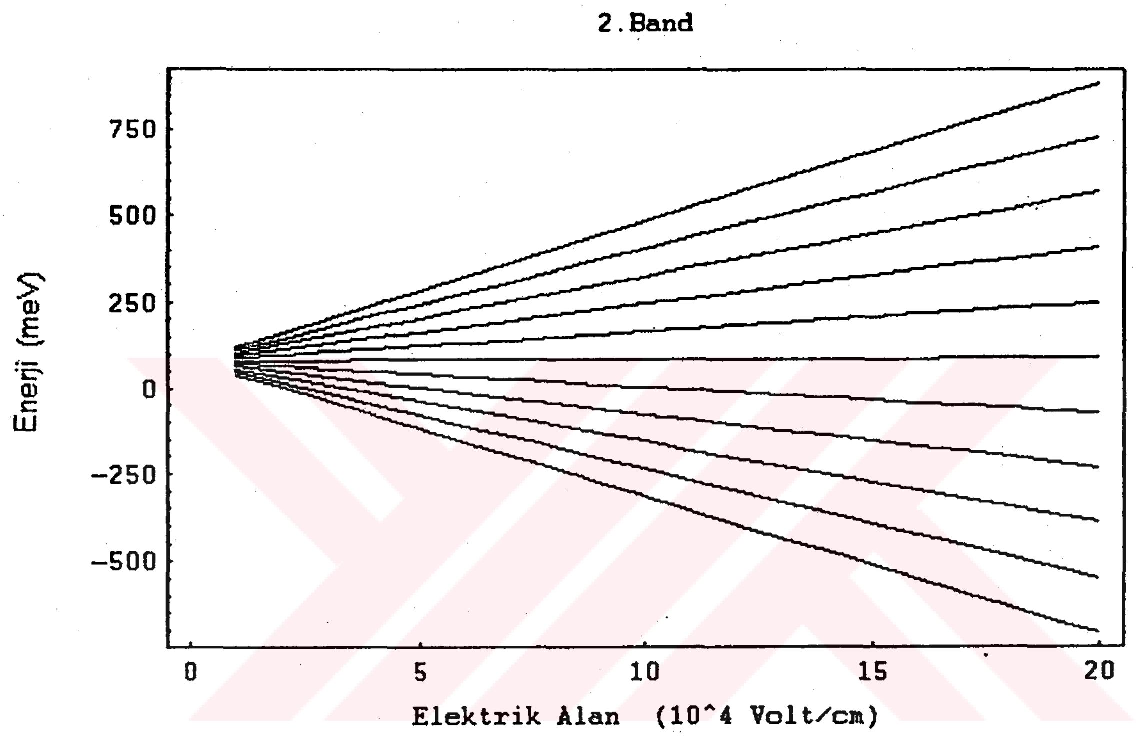


Şekil.25. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 2. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

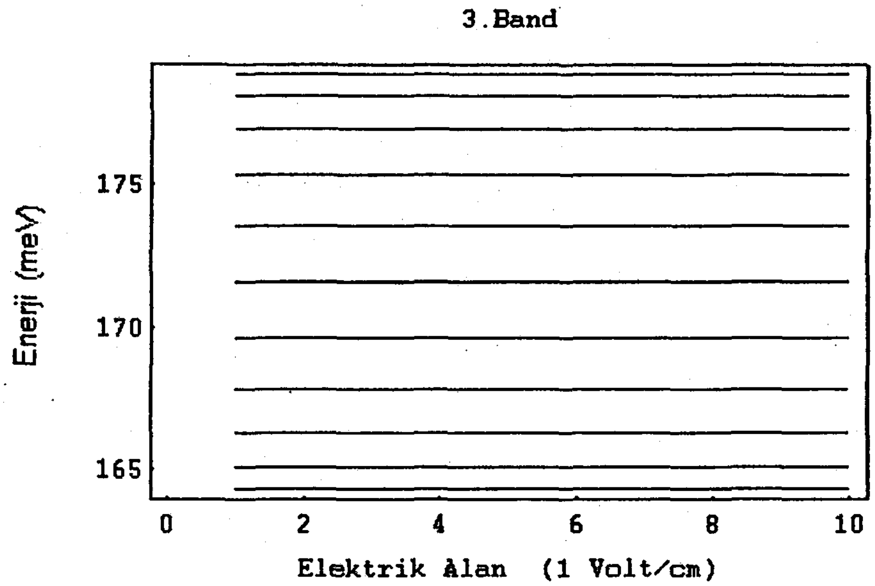


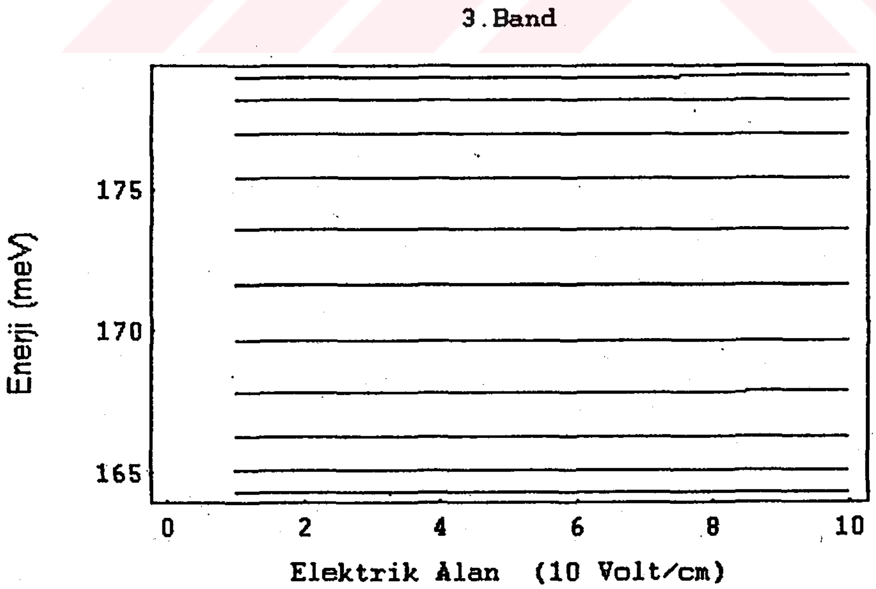


Şekil.26. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile2. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

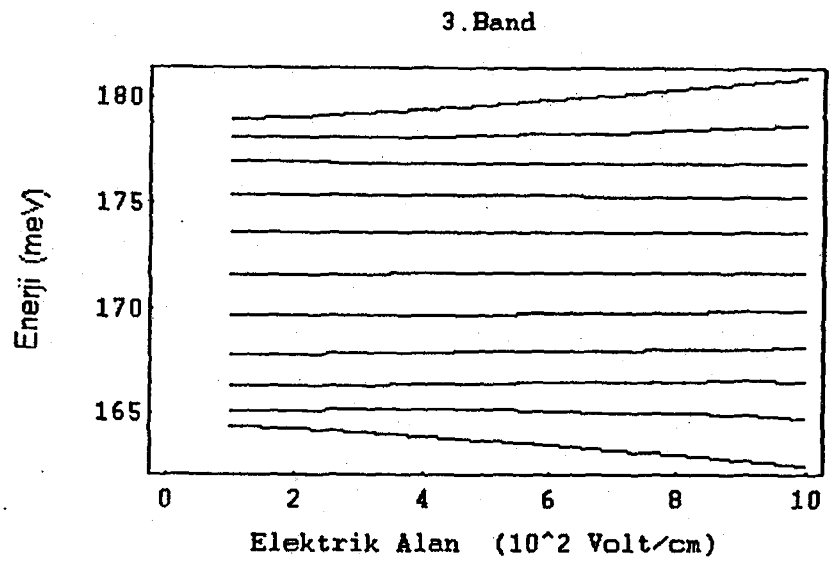


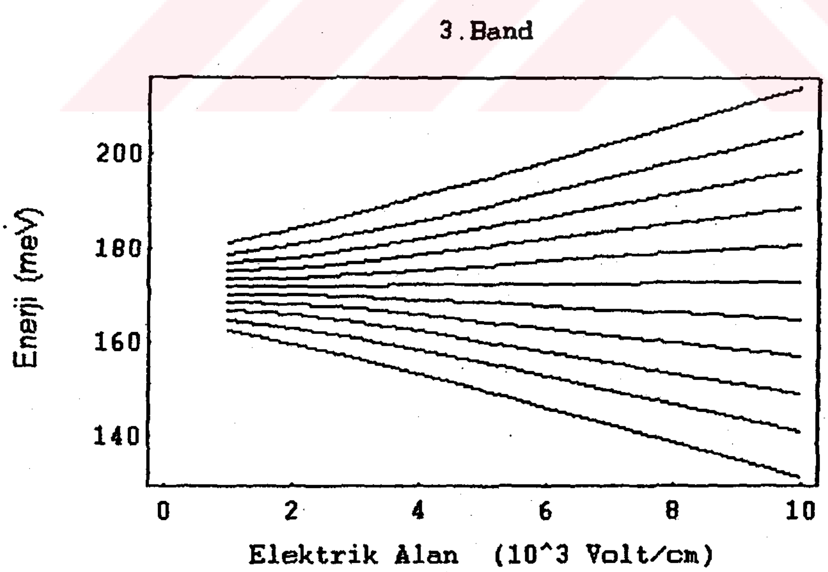
Şekil.27. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 2. Bandın F=10.000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



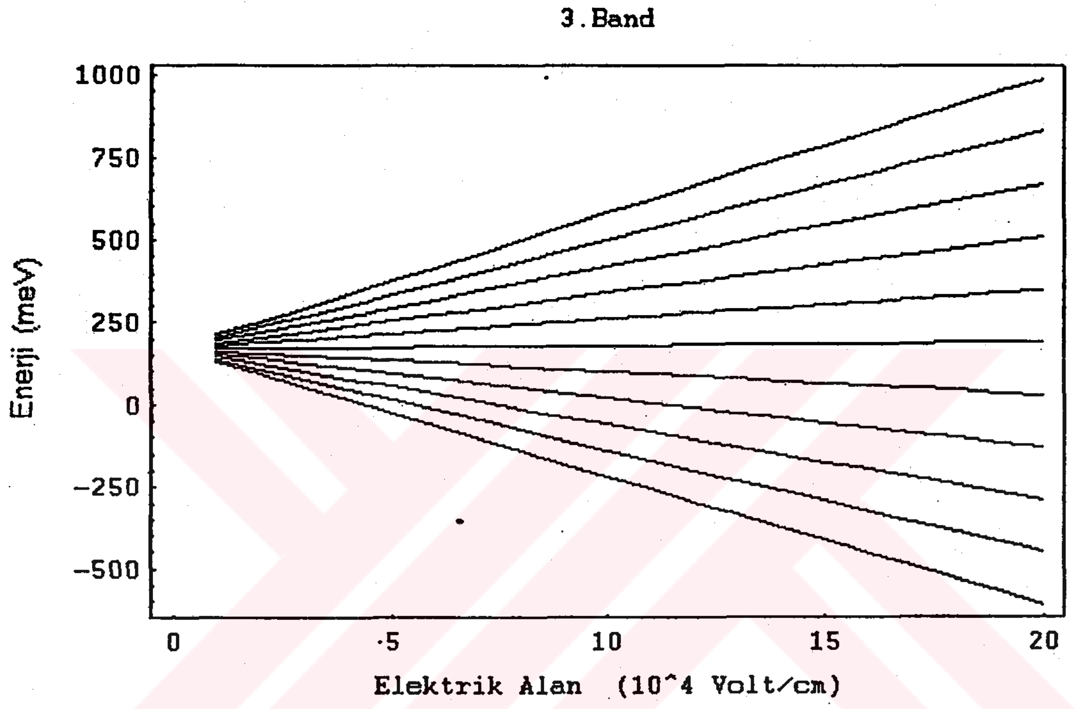


Şekil.28. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 3. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



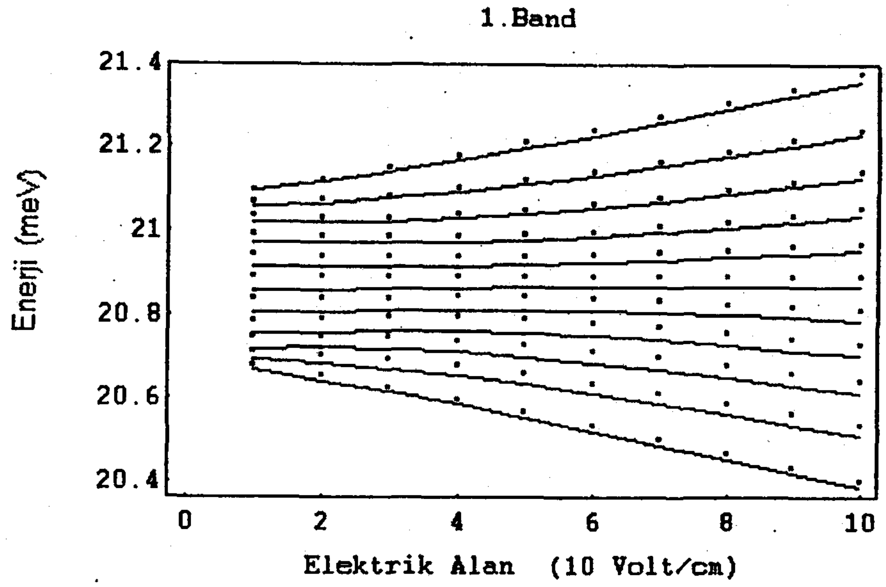


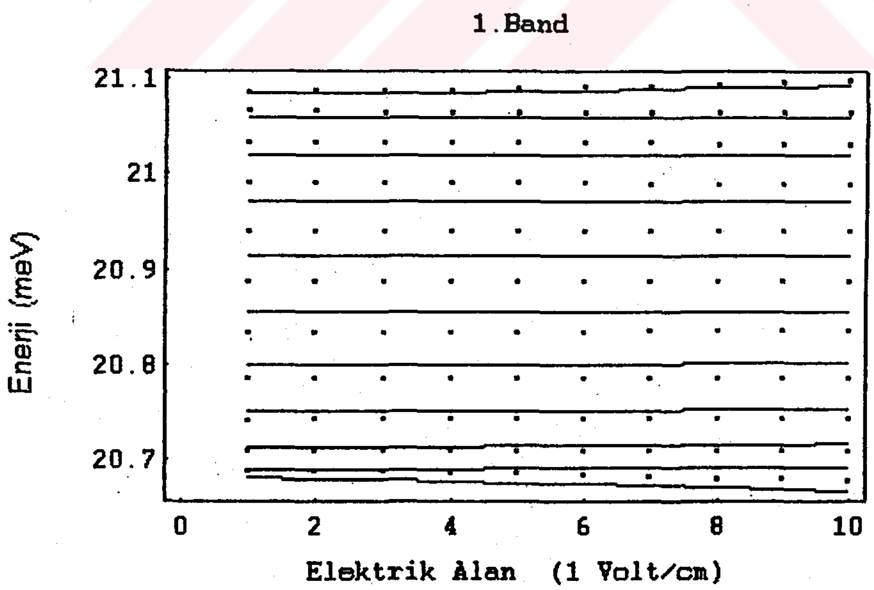
Şekil.29. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile 3. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



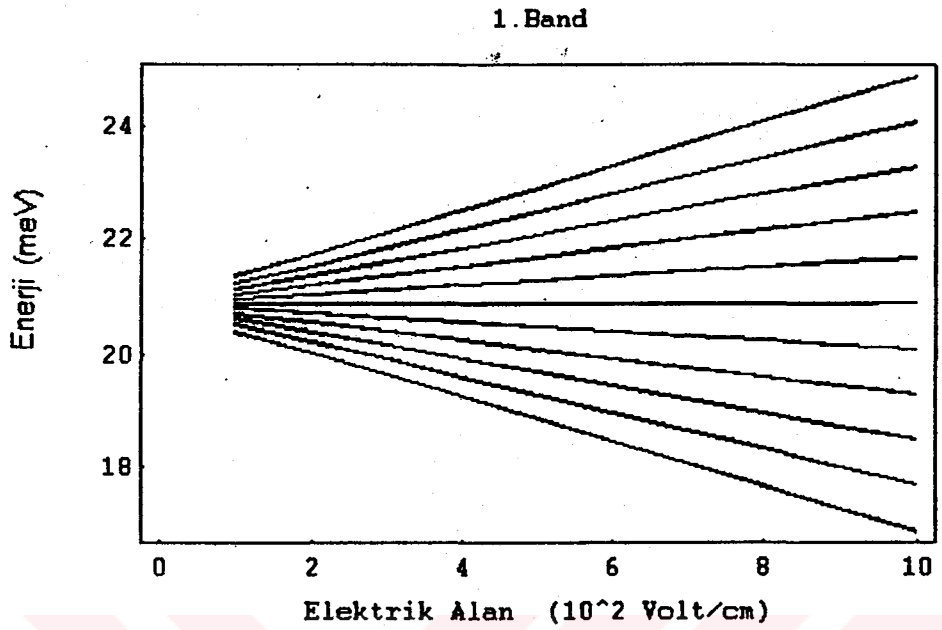
Şekil.30. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile3. Bandın F=10.000 Volt/cm için Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

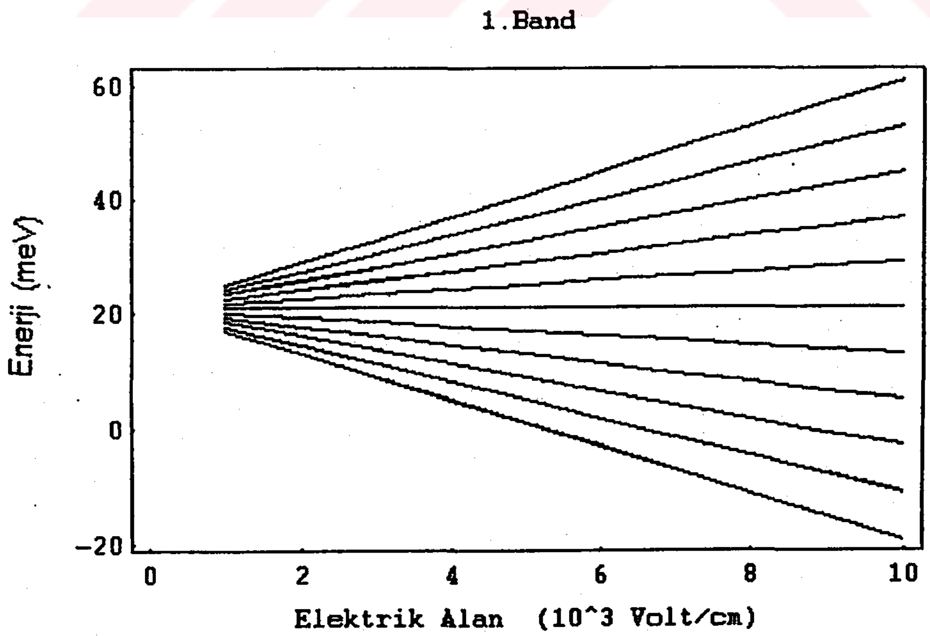
Burada sıkı-bağ yaklaşımı kullanılarak F elektrik alanına karşı bandların enerji spektrumu çizilmiştir. Burada da periyodik çözümler için çizilen Şekil.13-21'de görülen benzer grafikler ortaya çıkmıştır. Bundan sonra verilen grafiklerde incelediğimiz bu iki yöntemin grafikleri üstüste çizilecek ve bunların çakışma durumlarının F elektrik alanın büyük değerlerinde olduğu görülecektir.



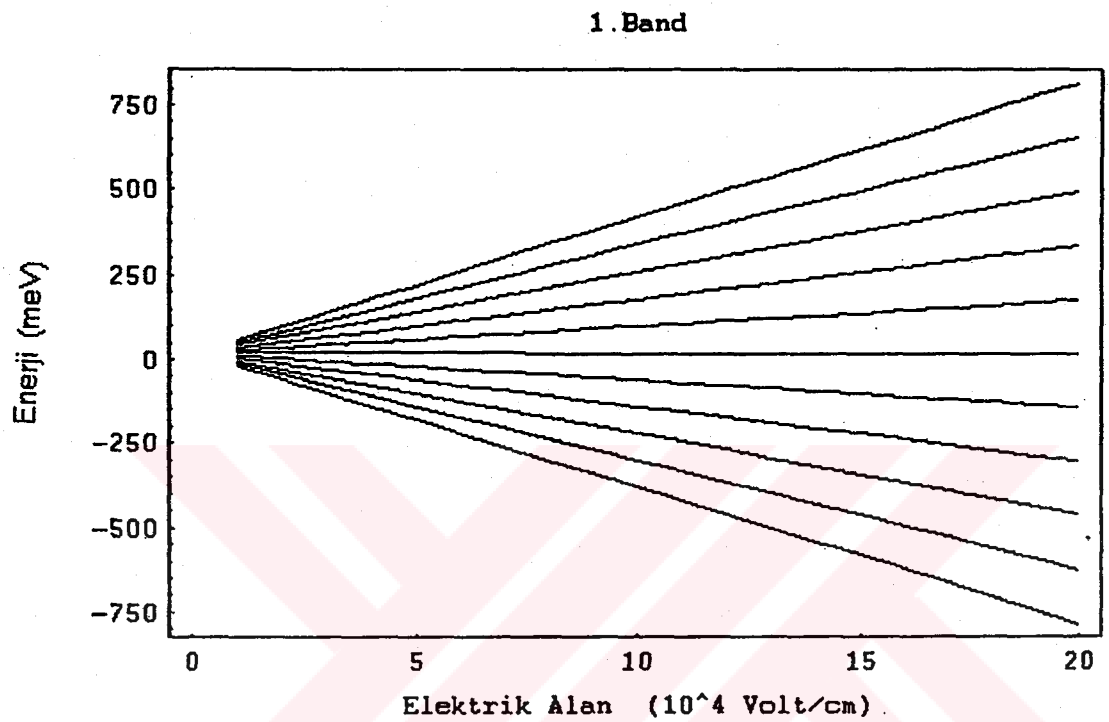


Şekil.31. 1. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

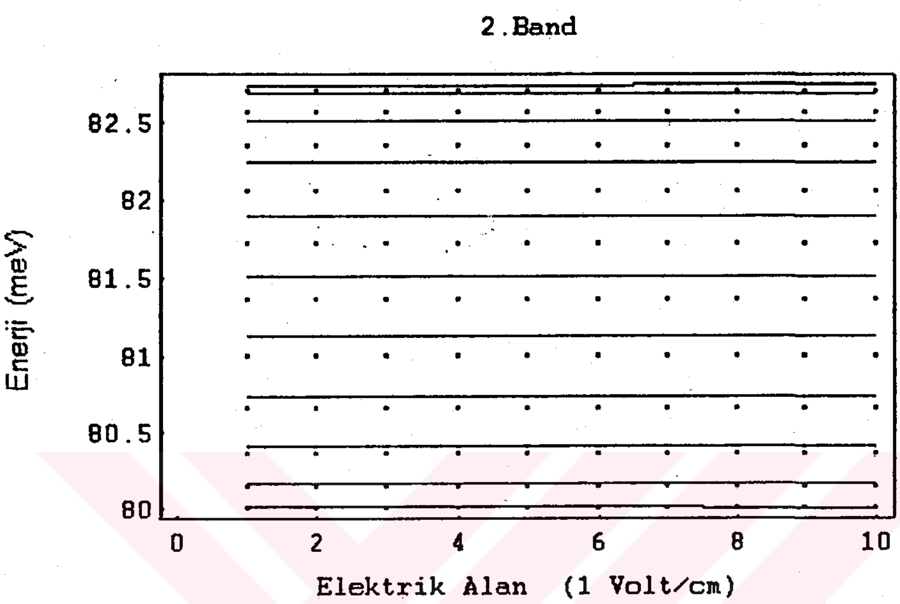




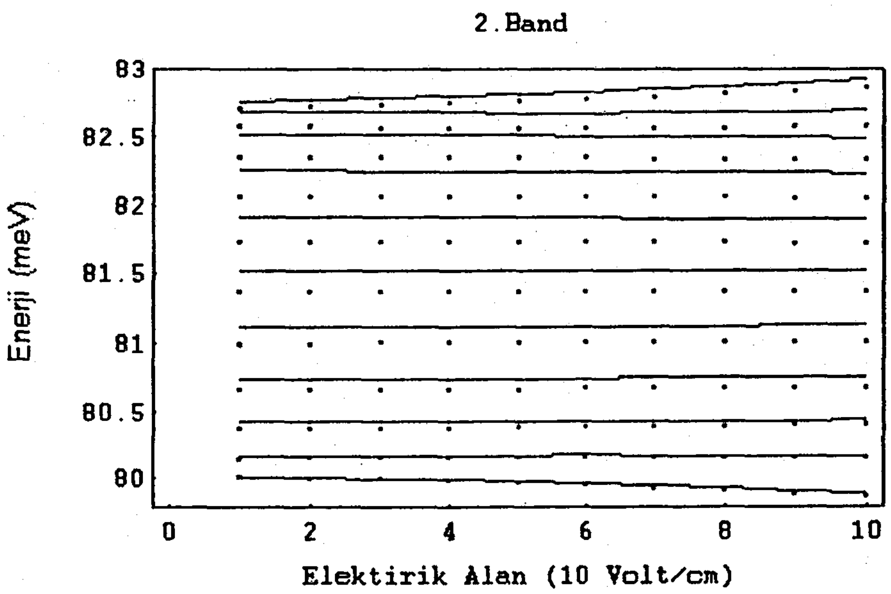
Şekil.32. 1. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

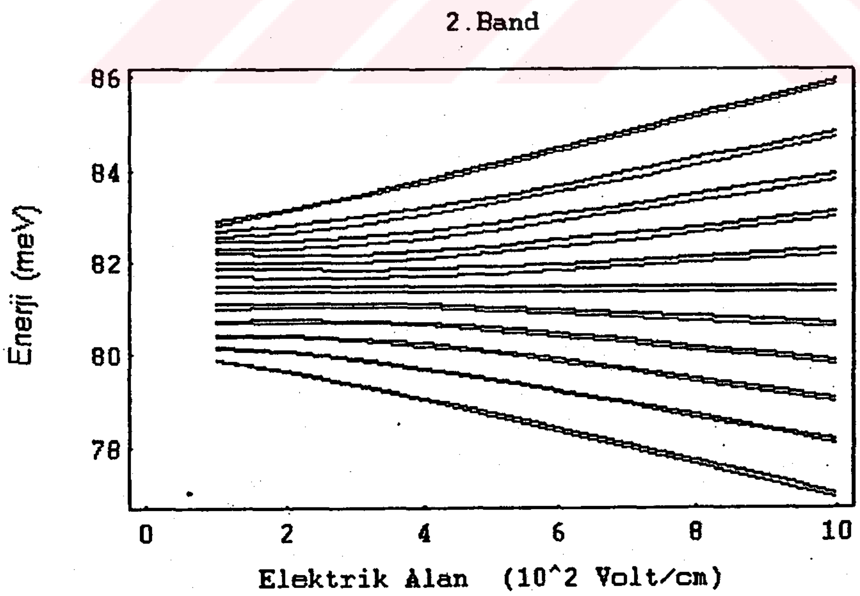


Şekil.33. 1. Bandın F=10.000 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

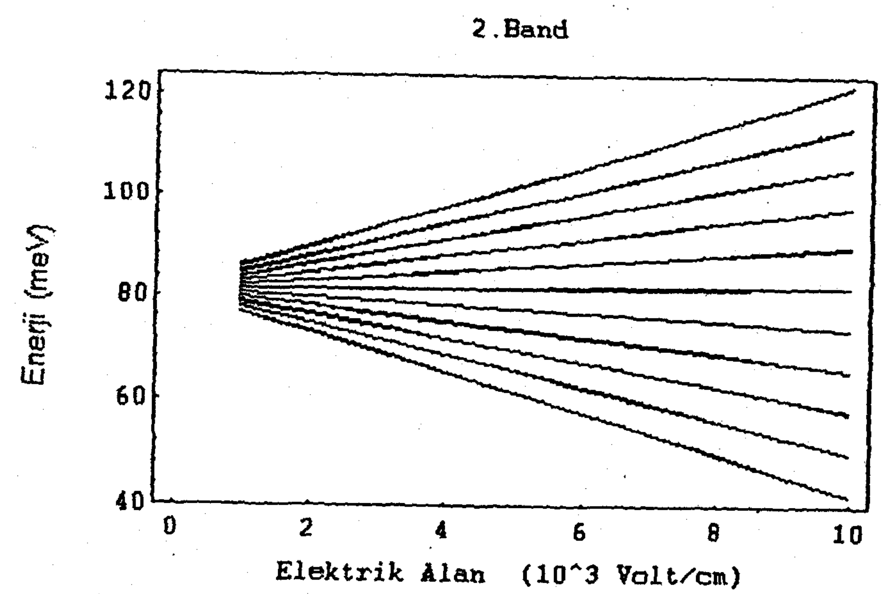


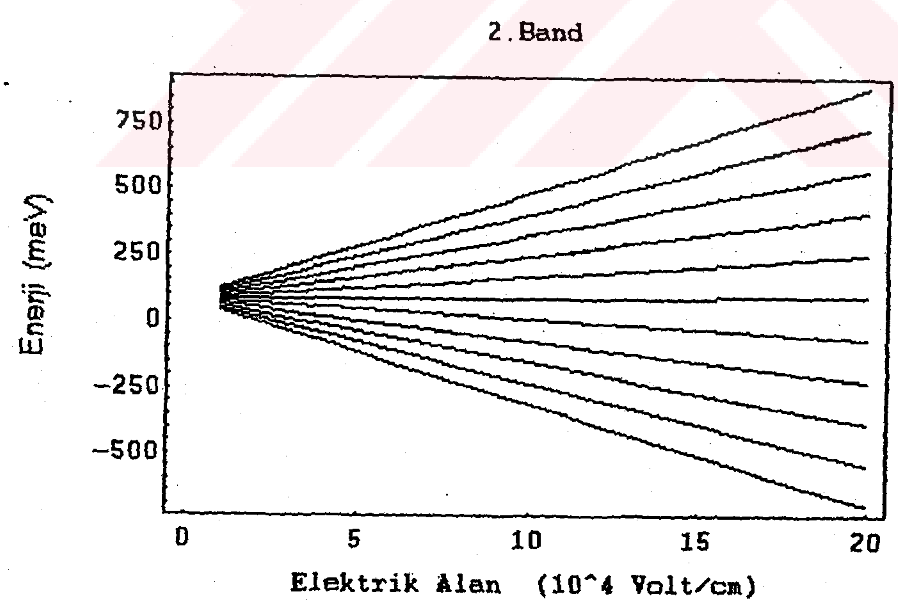
Şekil.34. 2. Bandın F=1 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



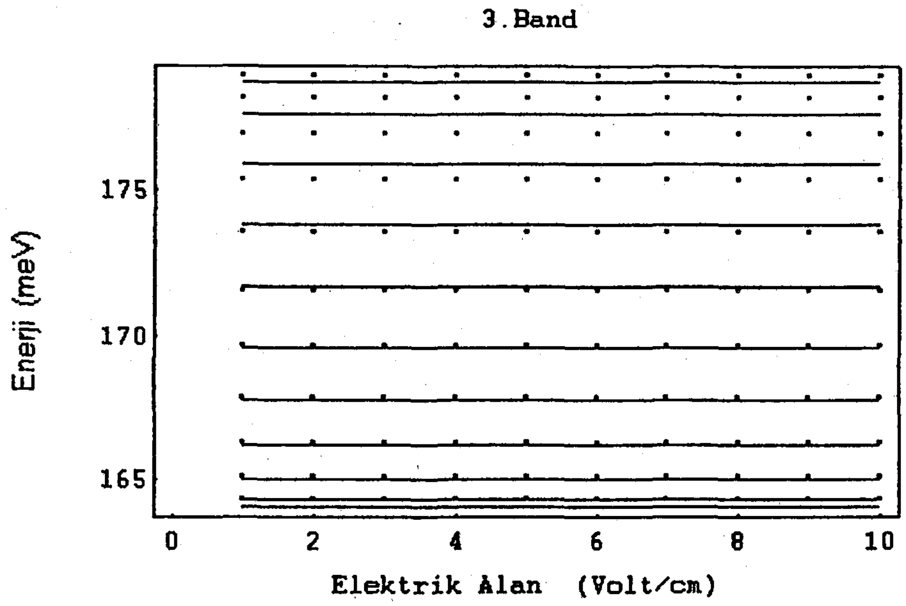


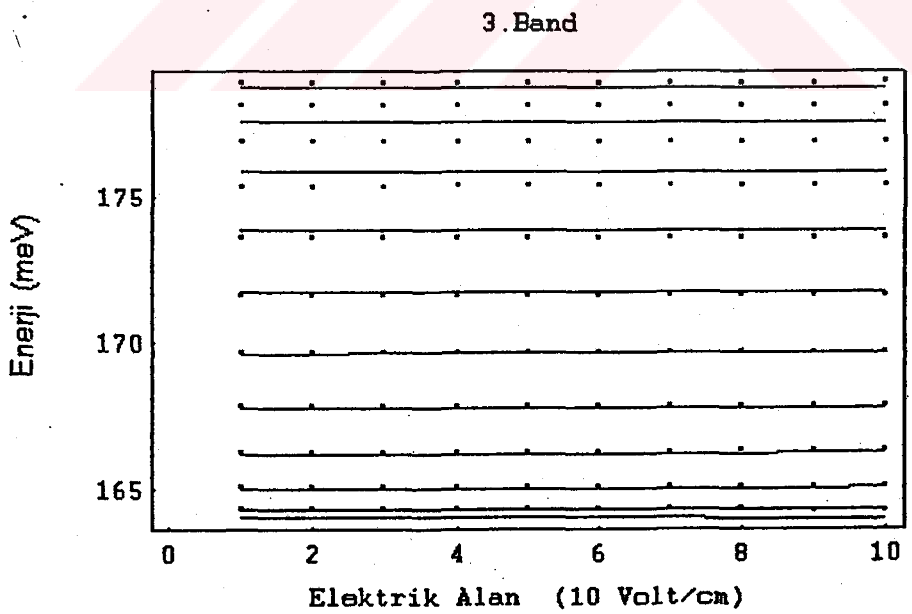
Şekil.35. 2. Bandın F=10 Volt/cm ve F=100 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



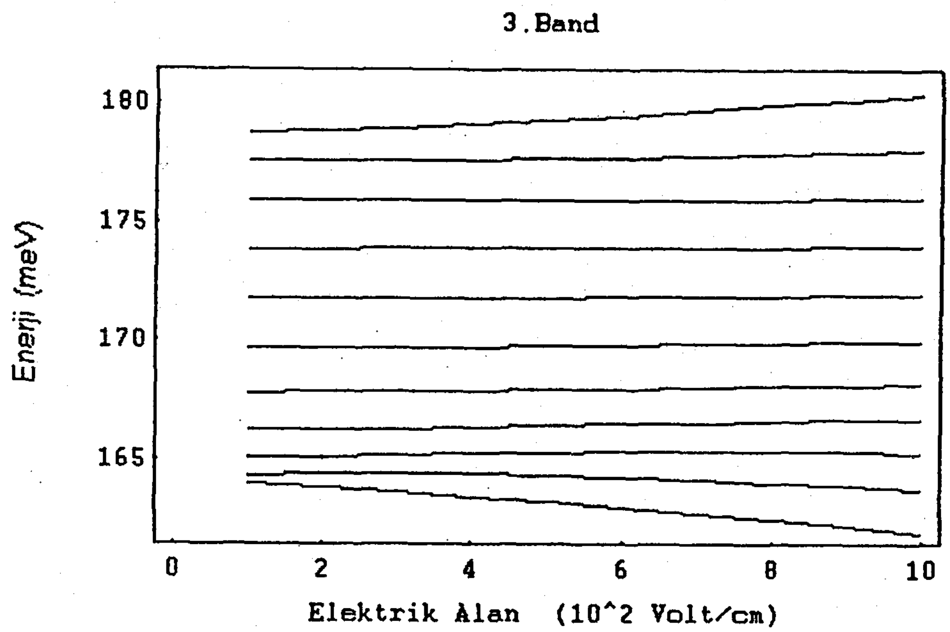


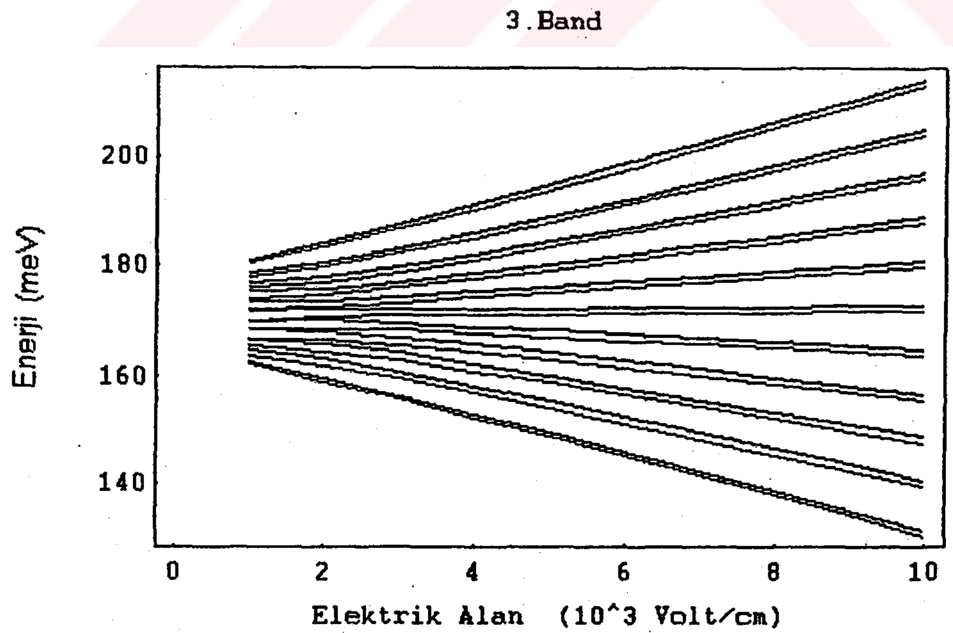
Şekil.36. 2. Bandın F=1000 Volt/cm ve F=10.000 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



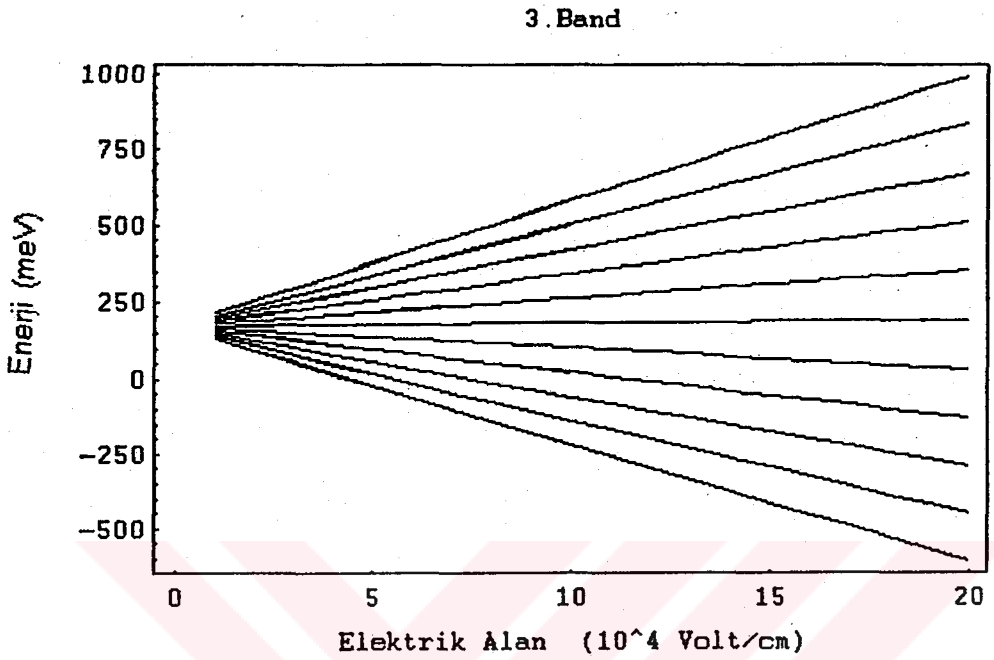


Şekil.37. 3. Bandın F=1 Volt/cm ve F=10 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.



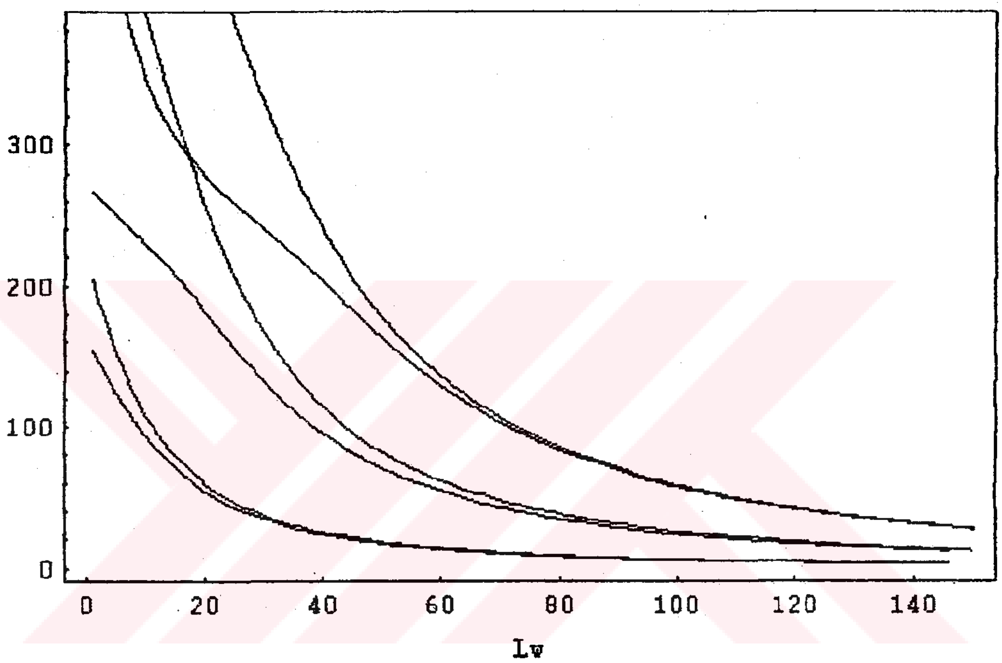


Şekil.36. 3. Bandın F=100 Volt/cm ve F=1000 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

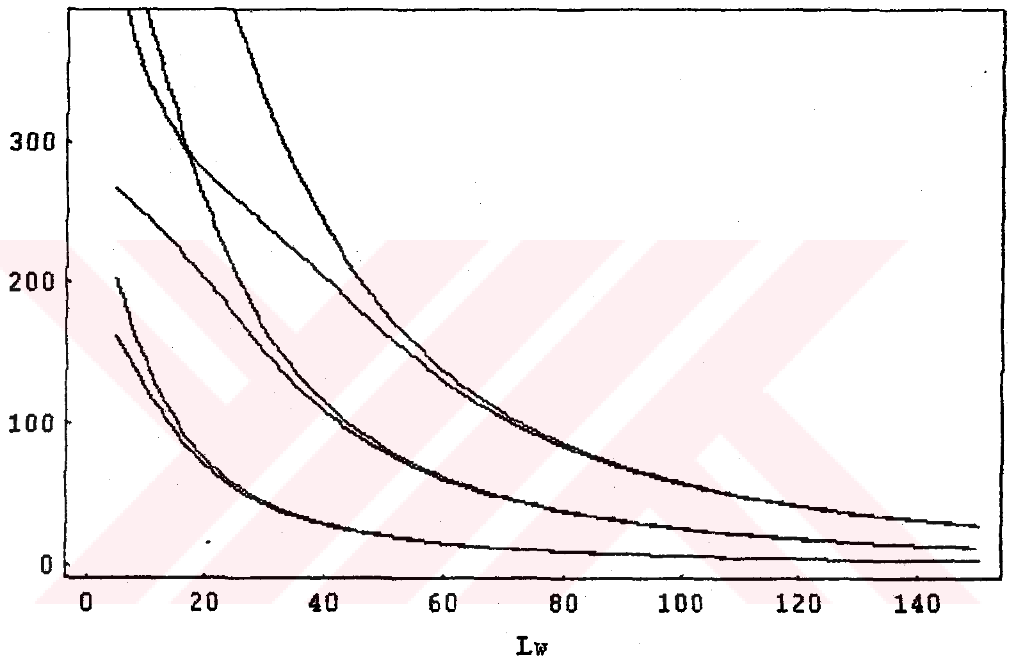


Şekil.39. 3. Bandın F=10.000 Volt/cm için (Periyodik Potansiyel ve Sıkı Bağlanma Yaklaşımı ile bulunan grafikler birlikte gösterilmiştir) Enerjinin Elektrik Alana göre Değişim Grafiği.

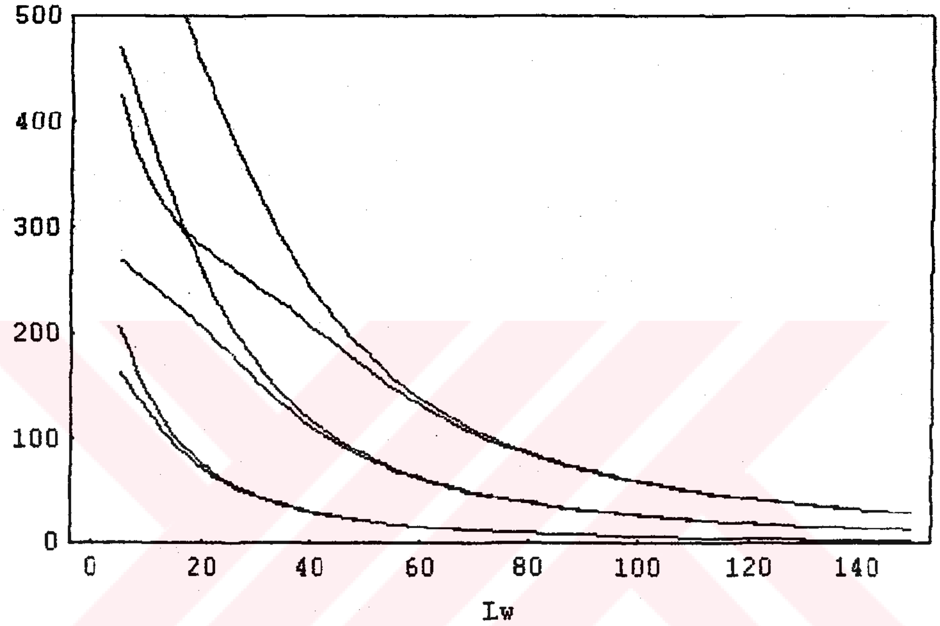
Son olarak bu iki yöntem grafikleri üstüste çizilmiş ve F elektrik alanının büyük değerlerinde tam bir çakışma olduğu görülmüştür. Bu, sıkı-bağ yaklaşımının çalıştığımız periyodik sistem sonuçlarına özellikle büyük F değerlerinde çok iyi uyduğunu gösterir. Bu sonuçlara bakarak iki yöntemin büyük F değerlerinde tam olarak aynı sonuçları verdiğini ve ladder yapısının her ikisinde de F elektrik alanının büyük değerlerinde oluştuğunu söyleyebiliriz.



Şekil.40. F=1 Volt/cm için Lw kuyu genişliğine karşı Enerji değişim grafiği.



Şekil.41. F=10^3 Volt/cm için Lw kuyu genişliğine karşı Enerji değişim grafiği.



Şekil.42. F=10^4 Volt/cm için Lw kuyu genişliğine karşı Enerji değişim grafiği.

Son olarak L_w kuyu genişliği 5-150 Å arasında değiştirilerek belli F elektrik alan değerleri için E enerji değişimi verilmiştir.

L_w kuyu genişliği küçüldükçe enerji düzeyleri arasındaki fark azalır ve enerji seviyeleri birbirine yaklaşır. Bunun sonucunda enerji bandlarının içiçe *geçtiği (crossover) görülür. Sözü edilen bu davranış 2. ve 3. bandlarda görülmektedir.*

L_w kuyu genişliği artırılırsa enerji düzeylerinin düşmesine bağlı olarak parçacıkların bariyer içine sızma olasılıkları azalacaktır. Bu durumda kuyulararası etkileşim ortadan kalkar ve böylece enerji spektrumu, izole tek kuantum çukuru sistemlerinin enerji dağılımına dönüşür.

L_w kuyu genişliği küçük değerlerden büyük değerlere doğru artırıldığında kuyuya girebilecek state sayısı ve buna bağlı olarak band sayısı artacaktır.

F=1 Volt/cm, eFΛ=0.0008 meV için enerji özdeğerleri

I .Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	20.6813	20.6884	0.0086	0.0108
-4	20.6899	20.7092	0.0238	0.0326
-3	20.7137	20.7418	0.0378	0.0426
-2	20.7515	20.7844	0.0487	0.0495
-1	20.8002	20.8339	0.0558	0.0532
0	20.8560	20.8871	0.0585	0.0532
1	20.9145	20.9403	0.0564	0.0496
2	20.9709	20.9899	0.0497	0.0425
3	21.0206	21.0324	0.0388	0.0327
4	21.0594	21.0651	0.0249	0.0207
5	21.0843	21.0858		

II.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	80.0083	80.0022	0.1577	0.1398
-4	80.1660	80.1420	0.2504	0.2223
-3	80.4164	80.3643	0.3251	0.2897
-2	80.7415	80.6540	0.3758	0.3373
-1	81.1173	80.9913	0.3975	0.3620
0	81.5148	81.3533	0.3874	0.3621
1	81.9022	81.7154	0.3446	0.3373
2	82.2468	82.0527	0.2716	0.2897
3	82.5184	82.3424	0.1738	0.2223
4	82.6922	82.5647	0.0600	0.1398
5	82.7522	82.7045		

III.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	164.0564	164.3137	0.2453	0.7545
-4	164.3017	165.0682	0.7250	1.2001
-3	165.0267	166.2683	1.1713	1.5641
-2	166.1980	167.8324	1.5620	1.8213
-1	167.7600	169.6537	1.8735	1.9546
0	169.6335	171.6083	2.0784	1.9546
1	171.7119	173.5629	2.1445	1.8214
2	173.8564	175.3843	2.0334	1.5640
3	175.8898	176.9483	1.7079	1.2002
4	177.5977	178.1485	1.1532	1.1532
5	178.7509	178.9029		

F=10 Volt/cm, $eF\Lambda = 0.008$ meV için enerji özdeğerleri

I .Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	20.6668	20.6772	0.0252	0.0330
-4	20.6920	20.7102	0.0248	0.0336
-3	20.7168	20.7438	0.0362	0.0417
-2	20.7530	20.7855	0.0480	0.0490
-1	20.8010	20.8345	0.0554	0.0527
0	20.8564	20.8872	0.0581	0.0527
1	20.9145	20.9399	0.0561	0.0490
2	20.9706	20.9889	0.0492	0.0417
3	21.0198	21.0306	0.0400	0.0336
4	21.0598	21.0642	0.0333	0.0330
5	21.0931	21.0972		

II.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	80.0072	80.0005	0.1595	0.1424
-4	80.1667	80.1429	0.2503	0.2221
-3	80.4170	80.3650	0.3250	0.2895
-2	80.7420	80.6545	0.3757	0.3373
-1	81.1177	80.9918	0.3975	0.3619
0	81.5152	81.3537	0.3872	0.3620
1	81.9024	81.7157	0.3445	0.3372
2	82.2469	82.0529	0.2713	0.2895
3	82.5182	82.3424	0.1725	0.2221
4	82.6907	82.5645	0.0654	0.1424
5	82.7561	82.7069		

III.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	164.0568	164.3147	0.2468	0.7549
-4	164.3036	165.0696	0.7245	1.2000
-3	165.0281	166.2696	1.1712	1.5640
-2	166.1993	167.8336	1.5620	1.8213
-1	167.7613	169.6549	1.8734	1.9545
0	169.6347	171.6094	2.0783	1.9545
1	171.7130	173.5639	2.1444	1.8212
2	173.8574	175.3851	2.0333	1.5640
3	175.8907	176.9491	1.7078	1.2000
4	177.5985	178.1491	1.1533	0.7550
5	178.7518	178.9041		

F=100 Volt/cm, $eF\Lambda = 0.08$ meV için enerji özdeğerleri

I .Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R (meV)	$\bar{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\bar{E}$(meV)
-5	20.3857	20.3994	0.1237	0.1361
-4	20.5094	20.5355	0.1011	0.1034
-3	20.6105	20.6389	0.0898	0.0875
-2	20.7003	20.7264	0.0846	0.0814
-1	20.7849	20.8078	0.0827	0.0802
0	20.8676	20.8880	0.0825	0.0802
1	20.9501	20.9682	0.0840	0.0814
2	21.0341	21.0496	0.0897	0.0875
3	21.1238	21.1371	0.1033	0.1034
4	21.2271	21.2405	0.1314	0.1360
5	21.3585	21.3765		

II.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R (meV)	$\bar{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\bar{E}$(meV)
-5	79.8913	79.8610	0.2737	0.2821
-4	80.1650	80.1431	0.2679	0.2489
-3	80.4329	80.3920	0.3206	0.2818
-2	80.7535	80.6738	0.3704	0.3286
-1	81.1239	81.0024	0.3924	0.3550
0	81.5163	81.3574	0.3810	0.3549
1	81.8973	81.7123	0.3341	0.3286
2	82.2314	82.0409	0.2570	0.2818
3	82.4884	82.3227	0.2055	0.2489
4	82.6939	82.5716	0.2322	0.2821
5	82.9261	82.8537		

III.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R (meV)	$\bar{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\bar{E}$(meV)
-5	163.9935	164.2897	0.3574	0.8022
-4	164.3509	165.0919	0.7026	1.1959
-3	165.0535	166.2878	1.1641	1.5606
-2	166.2176	167.8484	1.5589	1.8189
-1	167.7765	169.6673	1.8714	1.9524
0	169.6479	171.6197	2.0767	1.9525
1	171.7246	173.5722	2.1428	1.8189
2	173.8674	175.3911	2.0313	1.5606
3	175.8987	176.9517	1.7059	1.1958
4	177.6046	178.1475	1.1771	0.8023
5	178.7817	178.9498		

F=1000 Volt/cm, eFΛ=0.8 meV için enerji özdeğerleri

I .Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	16.8645	16.8830	0.8100	0.8128
-4	17.6745	17.6958	0.8011	0.8001
-3	18.4756	18.4959	0.8004	0.8000
-2	19.2760	19.2959	0.8002	0.8000
-1	20.0762	20.0959	0.8002	0.8000
0	20.8764	20.8959	0.8002	0.8000
1	21.6766	21.6959	0.8002	0.8000
2	22.4768	22.4959	0.8003	0.8000
3	23.2771	23.2959	0.8010	0.8001
4	24.0781	24.0960	0.8104	0.8129
5	24.8885	24.9089		

II.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	77.0313	76.9191	1.1162	1.1618
-4	78.1475	78.0809	0.9034	0.8970
-3	79.0509	78.9779	0.8310	0.8149
-2	79.8819	79.7928	0.8126	0.8012
-1	80.6945	80.5940	0.8088	0.8000
0	81.5033	81.3940	0.8092	0.8001
1	82.3125	82.1941	0.8142	0.8011
2	83.1267	82.9952	0.8337	0.8149
3	83.9604	83.8101	0.9005	0.8970
4	84.8609	84.7071	1.0882	1.1618
5	85.9491	85.8689		

III.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	161.9420	162.4939	1.8182	2.2481
-4	163.7602	164.7420	1.5308	1.8043
-3	165.2910	166.5463	1.3999	1.6435
-2	166.6909	168.1898	1.4871	1.7101
-1	168.1780	169.8999	1.7592	1.8235
0	169.9372	171.7234	1.9873	1.8235
1	171.9245	173.5469	2.0705	1.7101
2	173.9950	175.2570	2.0193	1.6435
3	176.0143	176.9005	2.0101	1.8043
4	178.0244	178.7048	2.3498	2.2481
5	180.3742	180.9529		

F=10000 Volt/cm, $eF\Lambda=8$ meV için enerji özdeğerleri

I .Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	-19.0599	-19.0413	8.0010	8.0012
-4	-11.0589	-11.0401	8.0001	8.0000
-3	-3.0589	-3.0402	8.0000	8.0000
-2	4.9411	4.9598	8.0000	8.0000
-1	12.9411	12.9598	8.0000	8.0000
0	20.9411	20.9598	8.0001	8.0000
1	28.9412	28.9598	8.0000	8.0000
2	36.9412	36.9598	8.0000	8.0000
3	44.9412	44.9598	8.0001	8.0000
4	52.9413	52.9598	8.0009	8.0012
5	60.9422	60.9610		

II.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	41.8156	41.7083	8.0444	8.0550
-4	49.8600	49.7633	8.0043	8.0002
-3	57.8643	57.7635	8.0015	8.0000
-2	65.8658	65.7635	8.0008	8.0000
-1	73.8666	73.7635	8.0007	8.0000
0	81.8673	81.7635	8.0007	8.0000
1	89.8680	89.7635	8.0009	8.0000
2	97.8689	97.7635	8.0015	8.0000
3	105.8704	105.7635	8.0045	8.0001
4	113.8749	113.7636	8.0438	8.0550
5	121.9187	121.8186		

III.Band'ın enerji özdeğerleri.

N(Kuyu Sayısı)	E_R(meV)	$\overline{E}$(meV)	ΔE_R(meV)	$\Delta\overline{E}$(meV)
-5	130.3512	131.2536	8.9711	9.3654
-4	139.3223	140.6190	8.2098	8.1262
-3	147.5321	148.7452	8.0620	8.0048
-2	155.5941	156.7500	8.0302	8.0001
-1	163.6243	164.7501	8.0217	8.0000
0	171.6460	172.7501	8.0208	8.0000
1	179.6668	180.7501	8.0260	8.0000
2	187.6928	188.7501	8.0465	8.0048
3	195.7393	196.7549	8.1690	8.1262
4	203.9083	204.8811	9.1609	9.3655
5	213.0692	214.2466		

Çalışmamızın bu bölümünde her bir bandın iki yöntemle belirlenen enerji *özdeğerleri ve ΔE enerji farkları tablo halinde verilmiştir.*

Tablodan da görüldüğü gibi küçük F değerlerinde ladder yapısı görülmemektedir. F=100 Volt/cm değeri için 1. bandda ancak ladder yapısı oluşmaya başlar. Fakat 2. ve 3. bandda henüz bir ladder yapısı görülmemektedir.

Tabloya dikkat edilirse F=10.000 Volt/cm için tüm bandlarda bir ladder yapı görülebilmektredir. Daha öncede bahsedildiği gibi F'in oldukça büyük *değerlerinde tam bir ladder düzeninden bahsedilebilir.*

EK-1 (DENK.(3-2-18)'İN BULUNUŞU)

Tam Hamiltonian'ın Wannier fonksiyonları üzerinden matris elemanlarını, Bloch fonksiyonları cinsinden;

$$\langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = N^{-1}\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}\langle F;n',k'|H|F;n,k\rangle \tag{1}$$

olarak yazabileceğimizi biliyoruz. Bunu daha önce Denk.(3-2-12) yardımıyla Denk.(3-2-17)'de tanımlamıştık.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{m=1}^{N} V_E(x-ma) - (eFa)\sum_{m=1}^{N} S\,(x/a-m) \tag{2}$$

Denk.(2)'yi Denk.(1)'de yerine yazalım;

$$\langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = N^{-1}\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}\left\langle F;n',k'\left|\frac{p^2}{2m} + \sum_{m=1}^{N} V_E(x-ma)\right|F;n,k\right\rangle$$

$$-(eFa)\left\langle F;n',k'\left|\sum_{m=1}^{N} S(x/a-m)\right|F;n,k\right\rangle \tag{3}$$

Eşitliğin sağ yanındaki ilk terimin H_F olarak tanımladığımız elektrik alana bağlı kısım olduğunu biliyoruz. Özdeğer denklemi;

$$H_F|F;n,k\rangle = \varepsilon(F;n,k)|F;n,k\rangle \tag{4}$$

biçiminde tanımlanabilir.

O halde;

$$\langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = N^{-1}\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}\langle F;n',k'|\varepsilon(F;n,k)|F;n,k\rangle$$

$$-(eFa)\left\langle F;n',k'\left|\sum_{m=1}^{N} S(x/a-m)\right|F;n,k\right\rangle \tag{5}$$

olacaktır. İlk terim,

$$\langle F;n',k'|\varepsilon(F;n,k)|F;n,k\rangle = \varepsilon(F;n,k).\,\delta_{n,n'}.\,\delta_{k,k'} \tag{6}$$

değerine sahiptir. Şimdi ikinci terime bakalım. Bunun için ilk olarak

$$\left|F;n',k'\right\rangle = e^{ik'x}u_{F;n',k'}(x) \tag{7}$$

$$\left\langle F;n,k\right| = e^{ikx}u^{*}_{F;n,k}(x) \tag{8}$$

biçiminde tanımlayacağımız dalga fonksiyonlarını yazalım. Şimdi Denk.(7) ve Denk.(8) kullanarak Denk.(5)'deki ikinci terimi tanımlayalım:

$$\int_{0}^{Na} dx.e^{i(k'-k)x}.u^{*}_{F;n,k}(x).u_{F;n',k'}(x).\sum_{m=1}^{N} S(x/a-m) \tag{9}$$

Burada $\int_{0}^{Na}$ integralinin sınırlarını düzenleyelim.

$$\int_{0}^{Na} = \int_{0}^{a} + \int_{a}^{2a} + \ldots\ldots + \int_{ma}^{Na} = \sum_{m=1}^{N-1}\int_{ma}^{Na} dx.e^{i(k'-k)x}.u^{*}_{F;n,k}(x).u_{F;n',k'}(x) \tag{10}$$

$$\left\langle F;n',k'\left|\sum_{m=1}^{N} S(x/a-m)\right|F;n,k\right\rangle =$$

$$\sum_{m=1}^{N-1}\sum_{p=m}^{N-1}\int_{pa}^{(p+1)a} dx.e^{i(k'-k)x}.u^{*}_{F;n,k}(x).u_{F;n',k'}(x) \tag{11}$$

$$= \sum_{m=1}^{N-1}\sum_{p=m}^{N-1} e^{i(k'-k)a}.\int_{0}^{a} dx.\,e^{i(k'-k)a}.u^{*}_{F;n,k}(x).u_{F;n',k'}(x) \tag{12}$$

Burada,

$$I(n,k;n',k') = \int_{0}^{a} dx.\ e^{i(k'-k)a}.u^{*}_{F;n,k}(x).u_{F;n',k'}(x) \tag{13}$$

şeklinde tanımladığımız overlap fonksiyonudur. Bu durumda, Denk.(12)'yi yeniden düzenleyerek yazarsak;

$$\left\langle F;n,k\left|\sum_{m=1}^{N} S(x/a-m)\right|F;n',k'\right\rangle = \sum_{m=1}^{N-1}\sum_{p=m}^{N-1} e^{i(k'-k)pa}.I(n,k;n',k') \tag{14}$$

Şimdi Denk.(14)'ün sağ tarafındaki toplam bölümünün değerini bulalım:

$$I_2 = \sum_{m=1}^{N-1}\sum_{p=m}^{N-1} e^{i(k'-k)pa} = \sum_{m=0}^{N-1} m.e^{i(k'-k)ma} \tag{15}$$

şeklinde yazabiliriz.

$e^{i(k'-k)a} = x$ *dönüşümü yapalım.*

$$I_2 = \sum_{m=0}^{N-1} m.x^m = x + 2x^2 + 3x^3 + \cdots\cdots + (N-1).x^{N-1}$$

$$= x.(1 + 2x + 3x + \cdots\cdots + (N-1).x^{N-2})$$

$$= x\frac{\partial}{\partial k}(x + x^2 + x^3 + \cdots\cdots + x^{N-1}) \tag{16}$$

$x + x^2 + x^3 + \cdots\cdots + x^{N-1} = \sum_{m=1}^{N-1} e^{i(k'-k)ma}$ olduğu kolaylıkla görülebilir.

Bunu seri açılımından,

$$\sum_{m=0}^{N-1} e^{i(k'-k)ma} = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots\cdots + x^{N-1}$$

$$= 1 - \frac{1-x^N}{1-x} \tag{17}$$

olduğunu söyleyebiliriz.

$x = e^{i(k'-k)a}$ *ise* $dx = -ia.e^{i(k'-k)a}dk$ ve $x = -\frac{1}{ia}\frac{dx}{dk}$ *olacaktır. O halde;*

$$I_2 = -\frac{1}{ia}\frac{dx}{dk}\frac{\partial}{\partial x}\sum_{m=0}^{N-1} e^{i(k'-k)ma} \tag{18}$$

$$I_2 = -\frac{1}{ia}\frac{\partial}{\partial k}\sum_{m=0}^{N-1} e^{i(k'-k)ma} \tag{19}$$

Denk.(17) eşitliği $k = k'$ *iken,*

$\sum_{m=0}^{N-1} e^{i(k'-k)ma} = 1 - \frac{1-e^{i(k'-k)Na}}{1-e^{i(k'-k)a}} = \frac{1-e^0}{1-e^0} = \frac{0}{0}$ belirsizliğini verir. O halde buna L' Hospital kuralını uygularız.

$$\frac{-\cancel{i}N\cancel{a}.e^{i(k'-k)Na}}{-\cancel{i}\cancel{a}.e^{i(k'-k)a}} = \frac{N.e^{i(k'-k)Na}}{e^{i(k'-k)a}} \quad \text{ve } k = k' \text{ iken } \frac{N.e^0}{e^0} = N \text{ olur.}$$

$$k \neq k' \text{ iken } \sum_{m=0}^{N-1} e^{i(k'-k)ma} = 0 \text{ olur.}$$

O halde;

$$\sum_{m=0}^{N-1} e^{i(k'-k)ma} = N.\delta_{k,k'} \tag{20}$$

Burada Dirac deltanın;

$\delta_{k,k'} = \begin{Bmatrix} 1 & k = k' \\ 0 & k \neq k' \end{Bmatrix}$ şeklindeki özelliğini hatırlarsak Denk.(20)'nin doğruluğu açıkça görülür. Buna göre Denk.(19)'u aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$I_2 = -\frac{1}{ia}\frac{\partial}{\partial k}(N.\delta_{k,k'}) = -\frac{N}{ia}\frac{\partial}{\partial k}(\delta_{k,k'}) \tag{21}$$

denklemi elde edilir.

Böylece Denk.(14) eşitliği;

$$\left\langle F;n,k \left| \sum_{m=1}^{N} S(x/a-m) \right| F;n',k' \right\rangle = -\frac{N}{ia}\frac{\partial}{\partial k}(\delta_{k,k'}).I(n,k;n',k') \tag{22}$$

biçiminde olacaktır. Şimdi Denk.(3)'e geri dönelim ve bulunan değerleri yerleştirelim;

$$\begin{gathered} \langle F;n',p'|H|F;n,p\rangle = N^{-1}\sum_{k,k'} e^{i(k'p'-kp)a}. \\ \left\{\varepsilon(F;n,k).\delta_{n,n'}.\delta_{k,k'} + (eFa)\frac{N}{ia}\frac{\partial}{\partial k}(\delta_{k,k'})I(n,k;n',k')\right\} \end{gathered} \tag{23}$$

Böylece Denk.(3-2-18)'in ispatını yapmış bulunuyoruz.

TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışma elektrik alanı altında N kare-kuyu potansiyelli bir sistemin enerji özdeğerlerinin bulunması ve ladder yapısının varlığı üzerinde yoğunlaşmıştır.

Elektrik alanı altında N kare-kuyu potansiyelli sistemi sonsuz kabul ederek hesaplarımızı yaparken bu sonsuz dizilime sahip sistemin 11 kuyuluk bölümünü gözönüne aldık. Sözü edilen bu sistemin alana bağlı Bloch tipi özfonksiyonları ve enerji özdeğerleri elde edildi.

N dizilimli kare-kuyu sistemine elektrik alan etkisini ikiye ayıran Emin ve Hart'ın tekniği kabul edildi. Sistemi tanımlayan dalga fonksiyonlarının oluşturulmasında baz fonksiyonları olarak alana bağlı Bloch fonksiyonlarını kullandık. Kuyularda lokalizasyonu sağlayabilmek için de baz olarak Bloch fonksiyonlarıyla aynı özelliklere sahip (ortanormal) Wannier fonksiyonları kullanıldı.

Böylece sistemin enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları Wannier fonksiyonları yardımıyla bulundu ve E enerji değerlerinin F elektrik alanına göre değişimleri incelendi. Sözü edilen bu değişimlerde küçük F değerlerinde ladder yapının oluşmadığı buna karşın büyük F değerlerinde ladder yapısının oluştuğu açıkça görülmektedir.

Daha sonra belli F değerlerinde artan L_w kuyu genişliğine göre sistemde oluşan bandların yapısı incelendi.

Burada $L_w \rightarrow 0$'a yaklaşırken enerji düzeyleri arasındaki fark azalır ve enerji seviyeleri birbirine yaklaşır. Bunun sonucunda enerji bandlarının içiçe geçtiği (crossover) görülür. Sözü edilen bu davranış çalışmamızda 2. ve 3. bandlararasında görülmektedir.

$L_w \rightarrow \infty$'a giderken (çalışmamızda $L_{wmax} = 150\,\mathring{A}$) enerji düzeylerinin düşmesine bağlı olarak parçacıkların bariyer içine sızma olasılıkları azalacaktır. Böylece enerji spekturumu, izole tek kuantum çukuru sistemlerinin enerji dağılımına dönüşecektir.

Küçük F (F<1 Volt/cm) değerlerinde ladder yapısı görülmez. Bunun sebebini enerji özdeğerlerine gelen imajiner kısımlardan kaynaklandığını söyleyebiliriz.

KAYNAKLAR

1) Emin, D., Hart, C. F., 1987. Existence of Wannier-Stark Localization: Physical Review B, 36, 14, s.7353-7359.

2) Eroğlu, Aslan, İşçi, Coşkun,1988. Katıhal Fiziği Ders Notları: Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Teksirler Serisi No:76, İzmir.

3)Emin, D., Hart, C. F.,1991. Reply to "Comment on 'Existence of Wannier-Stark Localization' ": Physical Review B, 43, 6, s.5169.

4) Gündüz, Erol, 1989. Modern Fiziğe Giriş: Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Kitaplar Serisi No:110, İzmir.

5) Hagon, J. P., Jaros, M., 1990. Stark Shifts in GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ finite-length Superlattices: Physical Review B, 41, 5, s.2900-2905.

6)Kleinman, Leonard, 1990. Comment on "Existence of Wannier-Stark Localization": Physical Review B, 41, 6, s.3857-3861.

7) Leo, James, MacKinnon, Angus, 1991. Comment on "Existence of Wannier-Stark Localization": *Physical Review B, 43, 6, s.5166-5168.*

8) Mendez, E. E.,Agullo-Rueda, F., and Hong, J. M.,1988. Stark Localization in *GaAs-GaAlAs Superlattices under an Electric Field: Physical Review Letters, 60, 23, s.2426-2429.*

9) Page, D. A., 1988. Electronic Stationary States in the Presence of Uniform Electric and Magnetic Fields and a Periodic Potantial: Physical Review B, 38, 18, s. 13411.

10) Sökmen, İsmail,1994. Wannier-Stark States for a Long Chain,yayınlanacak.

11) Sipe, J. E.,Dignam, M. M., 1991. Exciton Stark Ladder in Semiconductor Superlattices: Physical Review B, 43, 5, s.4097-4112.

ÖZGEÇMİŞ

1969 yılında Sivas'ta doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Sivas'ta tamamladıktan sonra 1986 yılında Cumhuriyet Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdi. 1990 yılında mezun oldu.1991 yılında aynı bölümde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. 1992 ikinci yarıyılında yüksek lisansa başladı. Halen aynı bölümde Araştırma Görevlisi olarak görevine devam etmektedir.