

**T.C.
KILIS 7 ARALIK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BİR İKİ VE ÜÇ BOYUTTA KUANTUM PSEUDODOT YAPILARI

Yunus SAKAR

FİZİK ANABİLİM DALI




Danışman: Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN

**KILIS
2012**

Her Hakkı Saklıdır

TEZ ONAYI

Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN danışmanlığında, Yunus SAKAR tarafından hazırlanan “**Bir, İki ve Üç Boyutlu Kuantum Pseudodot Yapıları**” adlı tez çalışması 12/07/2012 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Kilis 7 Aralık Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Fizik Anabilim Dalı**’nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	Unvanı, Adı Soyadı (Kurumu)	İmza
Başkan	Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN (Kilis 7 Aralık Üniv. Fen-Edeb. Fak. Fizik Böl.)	
Üye	Doç. Dr. Faruk YAŞA (K. Maraş Sütçüimam Üniv. Fen-Edeb. Fak. Fizik Böl.)	
Üye	Yrd. Doç. Dr. Şükrü ÇAKMAKTEPE (Kilis 7 Aralık Üniv. Fen-Edeb. Fak. Fizik Böl.)	

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunun/...../2012 tarih ve/..... sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Tez No:.....

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

Bir İki ve Üç boyutta Kuantum Pseudodot Yapıları

Yunus SAKAR

Kilis 7 Aralık Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN

Yıl: 2012

Sayfa:45

Bu çalışmada, Pseudo Harmonik potansiyel altında bir parçacığın enerji özdeğerlerinin nasıl bir değişim sergilediği enerjinin bağımlı olduğu parametrelere göre araştırılmıştır. Bu anlamda teorik bir çalışma yürütülmüştür. Bundan dolayı bir, iki ve üç boyutlu sistemlerde Pseudodot çözümlerinin belirlenmesi için Schrödinger denkleminin çözümü ele alınmıştır. Elde edilen sonuçlardan; bir boyutta enerji seviyeleri sadece n kuantum sayısına, iki boyutta n ve m kuantum sayısına bağlı bir değişim sergilerken üç boyutlu uygulamalarda bu değişim hem n kuantum sayısına ve l kuantum sayısına bağlı olarak karşımıza çıkmaktadır. Bir ve iki boyutlu uygulamalarda dejenerelik olmazken, üç boyutlu Pseudodot çözümlerinde enerjinin manyetik kuantum sayısına bağlı olmamasından dolayı dejenerelik söz konusudur. Pseudodot yapıları için enerji ve parçacığın belirli bir konumda bulunma ihtimali *Mathematica* programı yardımıyla nümerik olarak değerlendirilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Pseudodot, Pseudo Harmonik Potansiyel

ABSTRACT

MSc. Thesis

Quantum Pseudodot Structures in One Two and Three Dimensions

Yunus SAKAR

Kilis 7 Aralık University
Institute of Science and Technology
Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Abdurahman ÇETİN

Year: 2012

Page:45

In this study, energy eigenvalue of a particle under the pseudo harmonic potential have been investigated according to the related parameters. In this sense, a theoretical study was carried out. Therefore, Schrödinger equations solutions are discussed for the consequences of the solution in one, two and three dimensional Pseudo-harmonic potential. The results obtained, energy levels in one dimension depend on quantum number n and energy levels in two dimensions depend on quantum number n and m while three dimensional energy levels depend on quantum number n and angular momentum quantum number l . While there is not a degeneracy in one and two-dimensional applications, there is degeneracy in three-dimensional applications due to energy do not depend on magnetic quantum number m at Pseudodot solutions. Energy and probability of the particle according to the position was evaluated numerically by using *Mathematica* program for the Pseudodot structures.

Key Words: Pseudodot, Pseudo Harmonic Potential

TEŐEKKÜR

Bu tez alıőmasında bana her trl konuda destek olan ve yardımlarını esirgemeyen deęerli hocam, sayın Do. Dr. Abdurahman ETİN' e,

Her konuda yardıma hazır olan Fizik Anabilim Dalına baęlı dięer blm hocalarıma,

Ev arkadaşlarım Bahadır PALTA ve Ferhat POLAT' a,

Ayrıca maddi ve manevi anlamda her zaman yanımda olan deęerli aileme, aęabeyime, kuzenlerim Yasin SAKAR' a ve Cihan CAN' a en iten teőekkrlerimi sunuyorum.

Yunus SAKAR
Kilis, Haziran, 2012

İÇİNDEKİLER TABLOSU

ÖZET	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	i
İÇİNDEKİLER TABLOSU	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÖZGEÇMİŞ	viii
1. GİRİŞ.....	1
1.1. PSEUDO POTANSİYELİNİN TARİHÇESİ:	1
1.2. PSEUDOHARMONİK POTANSİYELİ NERELERDE VE NEDEN KULLANILIR.....	2
1.2. BİR BOYUTLU HARMONİK OSİLATÖR	4
1.2.1. Diferansiyel Denklemin Çözümü	5
1.3. ÜÇ BOYUTLU HARMONİK SALINICI PROBLEMİ	10
1.4. HİDROJEN ATOMU PROBLEMİNİN RADYAL KISMININ ÇÖZÜMÜ	12
2. PSEUDO HARMONİK POTANSİYEL KULLANILARAK YAPILAN ÇALIŞMALAR.....	15
3. PSEUDODOT ÇÖZÜMLERİ.....	18
3.1. BİR BOYUTLU PSEUDODOT ÇÖZÜMÜ VE ENERJİ SEVİYELERİ.....	18
3.2. İKİ BOYUTLU PSEUDODOT ÇÖZÜMÜ VE ENERJİ SEVİYELERİ	26
3.3. ÜÇ BOYUTLU PSEUDODOT ÇÖZÜMÜ VE ENERJİ SEVİYELERİ	32
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	37
KAYNAKLAR	45

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

L_n^k : Asosye Laguerre Polinomları

n : Temel Kuantum Sayısı

α : Enerji Parametresi

β : Enerji Parametresi

γ : Enerji Parametresi

μ : Dalga Fonksiyonu Parametresi

l : Yörünge Kuantum Sayısı

m : Manyetik Kuantum Sayısı

π : Sabit Sayı

r : Konum Değişkeni

φ : Azimutal Açısı

ψ : Dalga Fonksiyonu

H : Hamiltonyen

R_{nl} : Dalga Fonksiyonunun Radyal Kısımı

Y_l^m : Dalga Fonksiyonunun Açısal Kısımı

E_n : Enerji Özdeğeri

m : Kütle

\hbar : $h/2\pi$

h : Plank Sabiti

Z : Atom Numarası

ρ : Boyutsuz Konum Değişkeni

V: Potansiyel Enerji

N_{lm}: Normalizasyon katsayısı

P_l^m(cos θ): Asosye Legendre Polinomları

m = Manyetik Kuantum Sayısı

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1:Sert ve Yumuşak Potansiyeller	1
Şekil 2: Kartezyen Koordinatlarda Pseudo Harmonik Potansiyel.....	3
Şekil 3: Bir Boyutta, Taban Durumunda Pseudo harmonik Potansiyelde Bulunan Bir Parçacığın Bulunma Olasılığı.....	37
Şekil 4: Dalga Fonksiyonunun Temel Kuantum Sayısının Arttırılmasıyla Değişimi.....	38
Şekil 5:n=0, 1, 2 ve Gama=6 Değerleriyle Pseudo harmonik Potansiyelde Bir Parçacığın Dalga Fonksiyonunun Gösterdiği Değişim	39
Şekil 6: Birinci Uyarılmış Durumda Gama=1, 2, 3 Değerleri Pseudo harmonik Potansiyelde bulunan Parçacığın Bulunma Olasılıklarının Değişimi	39
Şekil 7: Artan Uyarılma Sayısıyla(Sol Taraf) ve Artan Gama Sayısıyla(Sağ Taraf) Bulunma Olasılıklarının Potansiyel Eksenli Değişimi	40
Şekil 8: Bir Boyutlu Pseudodot Yapısında Hapis Boyutunun (r_0) Artmasıyla Enerji Değişimi.....	41
Şekil 9: Artan Uyarılma Sayısı, Hapis Boyutu(Solda) ve Artan Yörünge Açısıl Momentum Katsayısı, Hapis Boyutu(Sağda) ile Enerji Değerlerinde Meydana Gelen Değişim	42
Şekil 10: Potansiyel değişim aralığının artmasıyla artan uyarılma sayısına bağlı olarak enerji değişimi(solda) ve artan uyarılma sayısı ile potansiyel değişim aralığının azalmasıyla enerjinin değişimi(sağda)	43
Şekil 11: Potansiyel Değişiminin Enerji Üzerindeki Etkisi.....	44

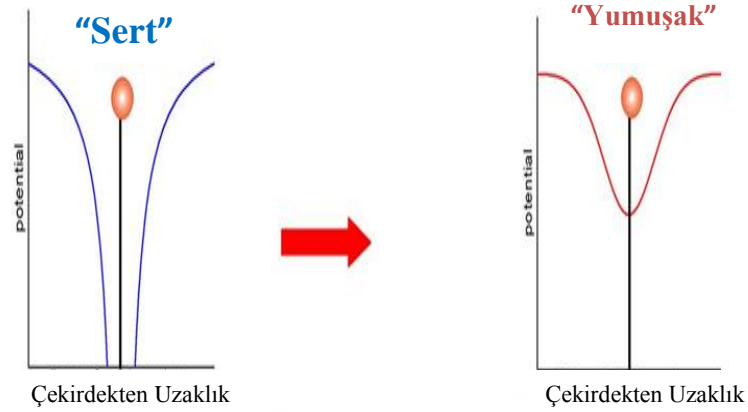
ÖZGEÇMİŞ

Temmuz 1988’de Batman’da doğmuş, ilk ve orta öğrenimini Batman’da tamamlamıştır. Haziran 2010 tarihinde Gaziantep Üniversitesi Kilis Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünü başarıyla tamamlamıştır. Mezun olduğu yıl Kilis 7 Aralık Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda Yüksek Lisansına başlamıştır.

1. GİRİŞ

1.1. PSEUDO POTANSİYELİNİN TARİHÇESİ:

Pseudo potansiyeli fikri, çekirdek potansiyeli için problemlerde kullanılan güçlü Coulomb potansiyelinin yerine çok daha yumuşak bir potansiyel tanımlamak amacıyla ortaya atılmıştır. Bu kavramın uzun bir geçmişi vardır ve Fermi'nin 1930'larda yayımladığı makalelerine kadar uzanır. Deneysel –Pseudo potansiyeli, 1950-1970 yılları arasında bant yapısı hesaplamalarında çoğu analitik ve nümerik olmak üzere başarıyla kullanılmıştır. Baştan sona geçişli (ab-initio) ve tam Pseudo potansiyeli 1980-1990 yılları arasında yoğunluk fonksiyonu teorisiyle (DFT) yapılabilen hesaplamalarda geliştirilmiştir. Günümüzde ise kullanılan pek çok farklı Pseudo potansiyeli çeşitleri vardır. Aşağıda şekil 1 de sert ve yumuşak potansiyellerin karşılaştırılması verilmiştir (Krasheninnikov, Helsinki University of Technology, 2008).



Şekil 1:Sert ve Yumuşak Potansiyeller

1.2. PSEUDOHARMONİK POTANSİYELİ NERELERDE VE NEDEN KULLANILIR

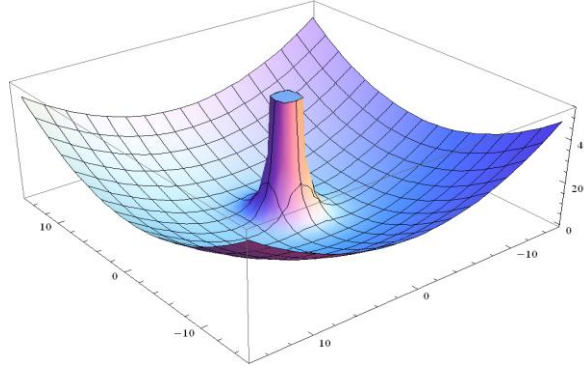
Pseudo potansiyeli yoğun madde fiziği ve malzeme biliminde deneysel ve teorik çalışmalarda kullanılan bir potansiyeldir. Yapılan bu tez çalışması teorik ağırlıklı bir çalışma olduğundan dolayı bu potansiyelin deneysel çalışmalarda kullanılma nedenlerine de değinmek daha doğru olur. Deneysel olarak yapılan çalışmalarda maddenin elektronik özellikleri, teorik olarak yapılan çalışmalarda ise Schrödinger denkleminin çözümüne yönelik araştırmalar göze çarpmaktadır.

- Pseudo potansiyeli elektronik yapıda genellikle atom yapısında bulunan elektronların varlığından nasıl kurtulabileceğinin bir yoludur. Çünkü farklı atomlarda çekirdek etrafındaki elektronları örtüşmez. Çekirdek etrafında bulunan elektronların oluşturduğu karmaşa; fizik, kimya, biyoloji gibi alanlarda önemini korur. Bu sebeple Pseudo Potansiyeli bu tür karmaşıklıkları gidermede önemlidir. Donmuş-çekirdek yaklaşımıyla atom yapısında var olan elektronların yapısal enerji değişimindeki rolü %2 lere kadar minimize edilmektedir. Ki buda çok küçük bir orandır. Bu yaklaşımla atom çekirdeği etrafında bulunan elektronların bağ yapısına katılması söz konusu değildir.
- Pseudo potansiyeli tüm elektron potansiyellerinden daha yumuşaktır. Pseudo Potansiyelinde çekirdek öz durumları yoktur. Pseudo potansiyelinin öngördüğü düzlem dalga metodu yoğunluk fonksiyonu teorisiyle (DFT) uyumludur. Elektronik yapıda Pseudo potansiyelinin kullanılması, daha öncede değinilmiş olarak çekirdek yapısındaki elektronlarından kurtulmak amaçlıdır. Bizim beklentimiz, Pseudo potansiyelinin çözülmesi kolay ve *Pauli Prensibine* uyan fonksiyonlar üretmesidir.
- Bir potansiyel katkılı (*additive*) ve geçişli (*transferable*) olmalıdır. Pseudo potansiyeli eldeki malzemenin yapısının anlaşılması adına teorik çalışmalarda uygulanacak yöntemleri basitleştirir. Etkili bir hesaplama yapabilmek için baz setinin boyutunu indirger. Sistemdeki elektron sayılarının etkisini azaltarak serbestlik derecelerinin sayılarını indirger. Rölativistik etkileri, etkili potansiyel içerisine kısmen dâhil eder. Pseudo harmonik potansiyeli Hamiltonyendeki

serbestlik dereceleri yerine geçer (Krashennikov, Helsinki University of Technology, 2008).

Bütün bu nedenlerden dolayı çalışılan problemin çözümüne yönelik kullanılacak potansiyel seçimi çok önemlidir. Potansiyel seçimi, uğraşılan problemin güçlük indeksini doğrudan etkiler.

Pseudo potansiyeli, elektronun doğru davranışını ifade etmek açısından önemlidir fakat mükemmel değildir. Sadece hesaplama tekniklerinde verimliliği artırır. Çekirdek bölgeleri dışında Pseudo potansiyeli ve toplam potansiyel benzer davranışlar sergiler: Değerlik elektronları için saçılma özellikleri aynıdır. Buraya kadar anlatılan kısımda Pseudo potansiyelinin deneysel ve teorik uygulamalarda neden kullanıldığına değindik.



Şekil 2: Kartezyen Koordinatlarda Pseudo Harmonik Potansiyel

Şekil 2 de Kartezyen koordinatlarda temsil edilen Pseudo harmonik potansiyeli verilmiştir. Yaptığımız Pseudopot çalışması böyle bir potansiyelin varlığındadır. Bundan sonra bu potansiyel altında Schrödinger denkleminin çözümünü yaparak kuantumlu enerji özdeğerlerinin nasıl değiştiği inceleyebilir. Konuya başlamadan önce basit harmonikosilatörün çözümüne değinmek doğru olacaktır. Basit harmonikosilatörün çözümü de bir Schrödinger dalga denkleminin çözümüdür. Sadece bu denkleme değişik potansiyeller uygulayarak kuantumlu farklı enerji değerleri elde edilir. Bu sistemlerin doğruluk dereceleri kullanılan potansiyel seçimi ve sistemi tanımlayacak dalga fonksiyonlarıyla doğru orantılıdır. Sisteminize uyguladığınız potansiyel ve dalga fonksiyonları ne kadar uygun ve kullanışlı ise elde edeceğiniz sonuçlardaki doğruluk derecesi de o derece hassas olur.

1.2. BİR BOYUTLU HARMONİK OSİLATÖR

Bir denge konumu etrafında salınımlar yapan bir parçacığın hareketi, fiziğin en temel problemlerinden birini oluşturur. Değişik birçok fiziksel sistemin (diatomik moleküllerin titreşimi, kristal örgülerde atomların veya çekirdek içinde nükleonların salınımları, ... vs.) temel yapısı bir harmoniksalınıcı problemidir. Burada vereceğimiz harmoniksalınıcının kuantal incelenmesi, tüm bu sistemlerin fiziksel davranışlarını doğru olarak tanımlayabilmektedir. Ayrıca, elektromanyetik alanların kuantum teorisi yapılmak istendiğinde, harmoniksalınıcının temsilleri anahtar rol oynamaktadır (Kuantum Alanlar Teorisi).

Salınıcı problemine iki farklı şekilde yaklaşılabilir: Bir yöntem Schrödinger diferansiyel denklemini doğrudan çözmek, diğer bir yöntemde ise salınıcıhamiltonyeni bir takım operatörler cinsinden yazmak ve operatör cebiri yardımıyla sonuca varmaktır. Burada biz diferansiyel denklem çözümü üzerinde duracağız.

Kütlesi m olan ve bir denge konumundan x uzaklığına bağlı olarak $F = -kx$ gibi bir kuvvetin etkisinde hareket eden bir parçacık ele alalım. Bu sistemin toplam enerjisi

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (1.3.1)$$

olarak yazılabilir. Burada $\omega = \sqrt{k/m}$ açısal frekanstır.

Kuantal çözümü bulmak için Schrödinger denklemi yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.3.2)$$

Matematiksel işlemlerde kolaylık sağlamak adına bu denklem boyutsuz hale getirilir. Önce bağımsız x değişkenini boyutsuz yapan bir α sabiti olduğunu varsayalım. Buna göre yeni bağımsız değişken

$$\rho = \alpha x$$

olur. $d^2/dx^2 = \alpha^2 d^2/d\rho^2$ olduğu göz önüne alınırsa Schrödinger denklemi

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{m\omega^2}{\hbar^2\alpha^4}\rho^2 \right] \psi(\rho) = 0 \quad (1.3.3)$$

şeklinde yazılabilir. Şimdi ρ^2 nin katsayısını 1 yapan α değeri seçilir. Bu yaptığımız işlem denkleminizi boyutsuzlaştırmaya dönüktür.

$$\frac{m\omega^2}{\hbar^2\alpha^4} = 1 \quad \text{veya} \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

olur. Daha sonra E enerji terimini boyutsuz yapan bir λ sabiti seçilir.

$$\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} = \lambda \quad \text{veya} \quad E = \frac{\hbar\omega}{2} \lambda$$

Şimdi boyutsuz Schrödinger denkleminizi yazabiliriz. Daha sonra bu diferansiyel denklem için bir çözüm önereceğiz. Schrödinger denklemini Pseudo potansiyeli altında çözdüğümüzde benzer metodu uygulayacağımız için bu kısımda anlatılanlara tekrardan değinilmeyecektir. İndirgenmiş diferansiyel denkleminiz aşağıdaki gibidir:

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} + (\lambda - \rho^2)\psi(\rho) = 0 \quad (1.3.4)$$

1.2.1. Diferansiyel Denklemin Çözümü

Diferansiyel denklemin çözümüne yönelik bir fikir edinmek üzere dalga fonksiyonumuzu uzun ve kısa limitte incelemeye tabi tutacağız ($\rho \rightarrow \pm\infty$). Bu limit değerlerinde inceleme yaparken λ lı terim küçük kalacağından ihmal edilebilir. Yaklaşık olarak elde edilen denklem;

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} + \rho^2\psi(\rho) = 0$$

olur. Bu diferansiyel denklemin çözümünü sağlayan dalga fonksiyonu; $\psi(\rho) = e^{-\rho^2/2}$ şeklindedir. Şimdide acaba sonlu ρ değerleri için de bu asimptotik davranışı gösteren çözümler yakalanabilir mi diye bakılır.

$$\psi(\rho) = e^{-\rho^2/2}u(\rho) \quad (1.3.5)$$

şeklinde çözümler aransın. Burada dikkat edilmesi gereken bir hususta; sonsuzda sınırlı kalabilmek için negatif üslü çözümün alınmasıdır. Schrödinger denkleminde kullanılmak üzere,

$$\frac{d\psi(\rho)}{d\rho} = (u' - \rho u)e^{-\rho^2/2} \quad (1.3.6)$$

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} = [u'' - 2\rho u' + (\rho^2 - 1)u]e^{-\rho^2/2} \quad (1.3.7)$$

İfadeleri yerine yazılırsa, yeni $u(\rho)$ fonksiyonunun sağlayacağı denklem,

$$u'' - 2\rho u' + (\lambda - 1)u = 0 \quad (1.3.8)$$

olur. Bu denklem *kuvvet serisine* açılarak veya *Frobenius yöntemi* kullanılarak çözülebilir. Bunun için $u(\rho)$ fonksiyonu bir kuvvet serisi şeklinde açılarak bir üstteki denklemde yerine yazılır.

$$u(\rho) = c_0 + c_1\rho + c_2\rho^2 + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} c_m\rho^m \quad (1.3.9)$$

Burada c_m katsayıları bulunursa $u(\rho)$ fonksiyonları bulunmuş olur. Bu seri cinsinden $u''(\rho)$ ve $u'(\rho)$ ifadeleri hesaplanarak (1.3.9) denkleminde yerine yazılırsa;

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)c_{m+2}\rho^m - 2\rho \sum_{m=0}^{\infty} mc_m\rho^{m-1} + (\lambda-1) \sum_{m=0}^{\infty} c_m\rho^m = 0$$

şeklinde bir denklem elde edilir. Bu denklemde gerekli ara işlemler yapıldığında aşağıdaki şekle indirgenir.

$$(m+1)(m+2)c_{m+2} - 2mc_m + (\lambda-1)c_m = 0 \quad (1.3.10)$$

Buradan hareketle c_m katsayıları arasında bir tekraralama (rekürans) bağıntısı elde edilir:

$$c_{m+2} = \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)}c_m \quad (1.3.11)$$

Kuvvet serisinin ilk iki katsayıları olan c_0 ve c_1 biliniyorsa, serinin diğer katsayıları da bu bağıntı sayesinde türetilir. Bu katsayıların oluşturduğu sonsuz terimli seri, aradığımız $u(\rho)$ fonksiyonu olacaktır.

Ancak burada karşımıza yeni bir sorun çıkmaktadır. Acaba bu sonsuz terimli seri çözümü yakınsak mıdır? Aksi takdirde dalga fonksiyonu olarak kabul edilemez. Bu sorunun yanıtını vermek üzere dolaylı bir yol izleyerek ardışık katsayılar oranı olan c_{m+2}/c_m ifadesinin m indisinin büyümesiyle nasıl değiştiğine bakalırsak:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{2m + 1 - \lambda}{(m + 1)(m + 2)} \rightarrow \frac{2}{m}$$

Bu serinin davranışının e^{ρ^2} fonksiyonunun davranışı şeklinde olduğu açıktır. Yani yine $u(\rho)$ fonksiyonunun davranışı gibidir.

$$e^{\rho^2} = 1 + \rho^2 + \frac{\rho^4}{2!} + \dots = \sum_{m \text{ çift}} \frac{\rho^m}{(m/2)!}$$

olduğu göz önüne alınırsa bu serinin katsayılarının asimptotik davranışı,

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{(m/2)!}{(m/2 + 1)!} = \frac{1}{m/2 + 1} \rightarrow \frac{2}{m}$$

Buradan da anlaşılacağı üzere serinin başlangıç terimleri farklı olabilir fakat ρ^m kuvvetleri yükseldikçe iki seride aynı davranışı sergiler. Bu durumda ψ dalga fonksiyonu

$$\psi = e^{-\rho^2/2} u(\rho) \rightarrow e^{-\rho^2/2} \times e^{\rho^2} \rightarrow e^{+\rho^2/2}$$

gibi davranacak, yani sonsuzda ıraksak olacaktır. O halde sonsuz terimli bir seri çözümü kabul edilemez. Bu güçlüğü aşmanın bir yolu vardır: c_m katsayılarını veren ifadeye tekrar bakılacak olursa m indisinin bir $m = n$ değerinde geldiğimizde payın sıfır olması gerekir. Burada $m = 0,1,2,3 \dots$ şeklinde ilerlemektedir. Seri bu ρ^n değerinde biter, çünkü bu c_n değerinden itibaren $c_{n+2} = c_{n+4} = \dots = 0$ olacak demektir. Böylece $u(\rho)$ çözümleri birer polinom olurlar. Bu durumda;

$$c_{m+2} = \frac{2m + 1 - \lambda}{(m + 1)(m + 2)} c_m$$

$$2n + 1 - \lambda = 0$$

olmalıdır. Burada daha önce tanımladığımız λ katsayısının ne olduğu hatırlanırsa;

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \lambda$$

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} (2n + 1) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2 \dots) \quad (1.3.12)$$

olur. Böylece seri çözümlerinin dalga fonksiyonu olabilme koşulunu sağlamasını isteyerek kuantumlu enerji öz değerlerini n nin değişen değerleriyle bulmuş oluruz. Şimdi dalga fonksiyonlarını bulmaya çalışalım.

$$c_{m+2} = \frac{2(m-n)}{(m+1)(m+2)} c_m \quad (2n+1 = \lambda \text{ olduğunu anımsayınız})$$

Bu katsayıları hesaplarken c_0 ve c_1 katsayıları keyfi seçilebilir. Özel olarak $c_0 = 1$ ve $c_1 = 0$ değerleri seçilirse *çift çözümler*, $c_0 = 0$ ve $c_1 = 2$ değerleri seçilirse *tek çözümler* olmak üzere, matematikte bilinen özel polinomlar ailesinden Hermite polinomları $H_n(\rho)$ elde edilir.

$$u_n(\rho) = H_n(\rho)$$

Başlangıçta dalga fonksiyonunu $\psi(x) = e^{-\rho^2/2} u(\rho)$ seçtiğimiz hatırlanırsa, harmonik salınıcı fonksiyonları da n kuantum sayısına bağlı olarak

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) \quad (\rho = \alpha x \quad \text{ve} \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar})$$

bulunur. A_n sabitini bulmak için dalga fonksiyonunun normlanması gerekmektedir.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 &= \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) \\ &= \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho e^{-\rho^2} H_n(\rho) H_n(\rho) \end{aligned} \quad (1.3.13)$$

Bu son integralin Hermite polinomları için diklik bağıntısı olduğu açıkça görülmektedir ($m = n$). Bunun değeri yazılırsa,

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}$$

bulunur. Özetle harmonik salıncı dalga fonksiyonlarının değişimi aşağıdaki gibi değişim sergilemektedir.

$$\psi_n(x) = A_n e^{-(\alpha x)^2/2} H_n(\alpha x) \quad \text{ve} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2 \dots)$$

Sonuçları değerlendirecek olursak;

- E_n özdeğerlerinin kuantize olduğunu ve eşit $\hbar \omega$ aralıklarla değiştiğini görebilirsiniz. Gerçektende diatomik moleküllerin titreşim yoluyla uyarılması sonucu elde edilen spektrumlarda her bir radyasyonun frekansı, doğal frekans denilen bir ν_0 değerinin tam katları şeklinde değişim sergilemektedir.
- Taban durumu ($n = 0$) enerjisinin sıfırdan farklı oluşu tamamen bir kuantal etkidir. Eğer $E_0 = 0$ olsaydı parçacık hem durgun ($p = 0$) ve hem de denge konumunda ($x = 0$) olurdu. Buda momentum ve konumun birlikte kesin olarak bilinmesi anlamına gelir ki bu durumda *belirsizlik ilkesine* aykırı olurdu. Taban durumu enerjisine *sıfır-noktası enerjisi* denir.
- Her bir ψ_n dalga fonksiyonunun tam n tane reel kökü veya düğüm noktası vardır. Bu özellik çok geneldir: *Enerji arttıkça dalga fonksiyonunun düğüm noktalarının sayısı da artar.*

Yine aynı yöntemle üç boyutta harmonik osilatörün enerji özdeğerleri için bir çözüm bulmak üzere işlemlerimize devam edeceğiz. Bir boyutlu çözümde gerekli ayrıntılara değindiğimizden dolayı üç boyutta ara işlemler üzerinde durulmayacaktır (Karaoğlu, 2008).

1.3. ÜÇ BOYUTLU HARMONİK SALINICI PROBLEMİ

Burada iki boyutlu harmoniksalınıcı probleminin çözümüne, üç boyutlu uygulamanın çözümünden ulaşılabileceğinden dolayı değinilmemiştir. Daha önce yaptığımız gibi 3-boyutlu harmoniksalınıcı hamiltonyenini tanımlayarak işe başlayalım.

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2z^2 \quad (1.4.1)$$

Burada her eksen boyunca ω elastik sabiti aynı alındığından, buna *izotropik salınıcı* da denir. Bu potansiyelde küresel simetriktir, çünkü

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

olur ve potansiyel açıdan bağımsızdır. O halde, radyal Schrödinger denkleminiz,

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{2}m\omega^2r^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (1.4.2)$$

olmaktadır. Bu denklemin her l için çözümü karmaşık olduğundan dolayı burada sadece s durumları yani ($l = 0$) durumu için çözümler arayacağız. Önce R yerine bir χ fonksiyonu tanımlayalım:

$$R = \frac{\chi}{r}$$

Bu χ fonksiyonu cinsinden radyal denklem ($l = 0$) için yazılırsa

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \right) \chi = 0 \quad (1.4.3)$$

olur. Bu denklemin çözümü bildiğimiz tek boyutlu harmoniksalınıcı denklemdir. Ancak bu kez sınır koşulları farklıdır. Radyal denklemin genel özellikleri incelerken

$$\lim_{r \rightarrow 0} [rR(r)] = \lim_{r \rightarrow 0} \chi \rightarrow 0$$

olması gerektiğini daha önce görmüştük. O halde, ancak tek indisli Hermite polinomları $r = 0$ da sıfır olacağından, çözümler

$$\chi(r) = A_{2n+1} H_{2n+1}(\alpha r) e^{-\alpha^2 r^2 / 2} (n = 0, 1, 2, 3 \dots) \quad (1.4.4)$$

$$R(r) = \frac{\chi}{r}$$

$$E_n = \left[(2n + 1) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega = \left(2n + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \quad (1.4.5)$$

şeklinde bulunur. Burada A_n normlama sabitidir ve α daha önce tanımlanmıştır. Görüldüğü gibi enerji özdeğerleri $3/2 \hbar \omega$ sıfır durumu enerjisiyle başlamakta ve iki birim artmaktadır.

Şimdide hidrojen atomunun radyal kısmının çözümüne kısaca değindikten sonra Pseudo potansiyeli altında radyal Schrödinger denkleminin bir, iki ve üç boyutta çözümlerini ele alacağız. Bu problemlerin çözümünü vermemizin amacı, ilerleyen aşamalarda karşımıza çıkacak zorlukların çözülmesi adına fikir edinmektir. Bir harmonik salıncı probleminin bir, iki ve üç boyuttaki çözümleri ve Hidrojen atomu probleminin çözümü bilinmeden Pseudo potansiyeli altındaki çözümleri kavramak güçtür. Bu problemlerden yola çıkarak Pseudo potansiyeli altında radyal Schrödinger denklemini çözerek enerji özdeğerlerini bulmamız daha da kolaylaşır. Çünkü bu problemler ileriki aşamalarda çıkmamız gereken merdivenin alt basamaklarını oluşturmaktadırlar.

1.4. HİDROJEN ATOMU PROBLEMİNİN RADYAL KISMININ ÇÖZÜMÜ

İndirgenmiş m kütleli bir parçacığın 3-boyutlu uzayda $V(r) = -Ze^2/r$ potansiyeli altındaki hareketi için radyal Schrödinger denklemi,

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (1.5.1)$$

şeklindedir. Burada $V(r)$ potansiyeli çekici olduğu için ($V \leq 0$), bağlı durumların varlığı ancak ($E < 0$) olduğunda mümkündür. Burada sadece bağlı durumlar incelenecektir.

Radyal denklemi boyutsuz hale getirmek amacıyla, boyutsuz bir ρ değişkeni ve λ enerji parametresi tanımlanırsa:

$$\rho = \alpha r \quad (\alpha^2 = -8mE/\hbar^2) \quad \text{ve} \quad E < 0$$

$$\lambda = \frac{Ze}{\hbar} \sqrt{-\frac{m}{2E}}$$

Boyutsuz radyal denklemimiz;

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[\lambda\rho - \frac{1}{4}\rho^2 - l(l+1) \right] R = 0 \quad (1.5.2)$$

şekline dönüşür.

Önce bu diferansiyel denklemin asimptotik davranışına bakılırsa;

- Küçük ρ değerleri için ($\rho \rightarrow 0$)

$$\lim_{r \rightarrow 0} R(r) \cong r^l$$

şeklinde davranır. Buna fonksiyonun kısa limitte davranışı da denir.

- Daha sonra büyük ρ değerleri için ($\rho \rightarrow \infty$), denklemdeki $\rho^2/4$ terimi diğerlerini bastıracağı için, yaklaşık olarak,

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{1}{4} \rho^2 R = 0$$

alınabilir. Bu genel çözümü,

$$R(\rho) = Ae^{-\rho/2} + Be^{+\rho/2}$$

olmaktadır. Dikkat edilecek olursa bu çözümün sonsuzda ıraksak olmaması için $B = 0$ olması gerekir. Bu fonksiyonun asimptotik davranışını inceledikten sonra, $R(\rho)$ dalga fonksiyonu için

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L(\rho)$$

şeklinde bir çözüm aranması gerekmektedir. Bu asimptotik davranışı ele almaktaki amaç, kalan $L(\rho)$ fonksiyonu için polinom şeklinde bir çözüm yakalamaktır. Eğer ara işlemler yapılırsa bir *Laguerre polinomu* şeklinde bir denklem elde edileceği görülecektir.

Bu ifade radyal denklemde kullanılırsa, $L(\rho)$ nun sağladığı yeni denklem

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho) \frac{dL}{d\rho} + (\lambda - l - 1)L = 0 \quad (1.5.3)$$

halini alır. Bu denklem için daha öncede belirtilmiş olarak kuvvet serisi yöntemiyle çözüme gidilir. $L(\rho)$ fonksiyonu bir kuvvet serisine açılarak yukarıdaki denkleme uyarlanacak şekilde türevler alındığında varacağımız yer;

$$L(\rho) = c_0 + c_1 \rho + c_2 \rho^2 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \rho^i \quad (1.5.4)$$

$$\sum_i [i(i+1)c_{i+1} + (2l+2)(i+1)c_{i+1} - ic_i + (\lambda - l - 1)c_i] \rho^i = 0$$

- Bu eşitliğin her ρ değerinde sağlanabilmesi için köşeli parantez içerisindeki terimlerin sıfır olması gerekir. Buradan c_i katsayıları için bir tekrarlılama bağıntısı elde edilir:

$$c_{i+1} = \frac{i + l + 1 - \lambda}{(i + 1)(i + 2l + 2)} c_i \quad (1.5.5)$$

- Daha sonra bu seri çözümü, yakınsak mı yoksa ıraksak mı şeklinde daha öncede bahsedilmiş olarak bir denemeye tabi tutulur. Bu sorunun çözülmesi içinde seri çözümünün sonlu bir değerde bitmesi gerektiği kanaatine varılacaktır. Bunun için de tekrarlılama bağıntısında belli bir i_{max} değerinden sonra payın sıfır olması gerektiği anlaşılacaktır.

$$i_{max} + l + 1 = \lambda$$

- Eşitliğin sol tarafındaki indisler birer tamsayı olduğundan, sağ taraftaki λ enerji parametreside tamsayı olmak durumundadır. Bu tamsayı değeri n ile gösterilir ve *temel kuantum sayısı* adını alır.

$$i_{max} + l + 1 = n$$

Burada ($i_{max} = 0,1,2,3 \dots$) gibi her değeri alabileceği için $l = n - 1 - i_{max}$ yörünge kuantum sayısı da ancak ($l = n - 1, n - 2, \dots, 2,1,0$) değerlerini alabilir veya $l \leq n - 1$ olur.

- $\lambda = n$ parametresini enerjiye bağlayan ifade kullanılırsa

$$n = \frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{-\frac{m}{2E}}$$

Hidrojen atomu için enerji düzeyleri elde edilmiş olur:

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n = 0,1,2,3 \dots) \quad (1.5.6)$$

2. PSEUDO HARMONİK POTANSİYEL KULLANILARAK YAPILAN ÇALIŞMALAR

Pseudo harmonik potansiyeli hem dot hemde antidot potansiyelini içermektedir. Daha öncede belirtildiği gibi Coulomb potansiyelinden daha yumuşak bir potansiyeldir. Bizim yapmış olduğumuz çalışmada Pseudo harmonik potansiyelinde antidot ifadesi sıfır yapan değerlerin limiti alındığında sistemin basit harmonikosilatöre indirgenmesini bekleyebiliriz. Pseudo harmonik potansiyel kullanılarak hem deneysel hem de teorik çalışmalar yapılmıştır. Şimdi bu çalışmalardan kısaca bahsedelim.

Kaliforniya üniversitesinden James R. Chelikowsky ve Marvin L. Cohen yerel olmayan deneysel bir Pseudo potansiyeli şeması altında Si, Ge, α -Sn, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, ZnSe, ve CdTe gibi on bir yarı iletkenin elektronik yapısı için hesaplamalar yapmışlardır. Bant yapısı, yansıma spektrumları, elektronik yoğunluk durumları ve değerlik yük yoğunlukları belirlenmiş ve deneysel verilerle karşılaştırılmıştır. Optik boşluklar, optik kritik nokta topolojileri, valans bant genişlikleri ve değerlik yük dağılımları geliştirilerek daha önceki yerel Pseudo potansiyeliyle elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır (Chelikowsky & Cohen, 1976).

A. Çetin Aharanov-Bohm etkisiyle birlikte bir manyetik alan varlığında hem dot hem de antidot içeren Pseudo harmonik potansiyelde, hapsedilmiş bir elektrona karşılık gelen dalga fonksiyonlarını ve enerji seviyelerini araştırmıştır. Enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonlarını böyle tam çözülebilir sistemler için bulmuştur. Bunların hepsi çeşitli koşullar altında test edilmiş ve literatürdeki verilerle kıyaslanmıştır (Cetin, 2008).

Kaliforniya üniversitesi kimya bölümünden, Jiangtao Hu, Lin-wangWang, Liang-shiLiWeidongyang ve A.Paul AlivisatosCdSe kuantum çubuklarının uzunluğu ve çapının elektronik durumlara bağımlılığını, yarı deneysel Pseudo potansiyeli hesaplamalarını kullanarak araştırmışlardır. Boy oranı karşısında çapraz enerji seviyeleri farklı uzunluklarına bağlı olarak artmıştır. Bu hesaplamalar sıfır boyutlu kuantum noktalarından bir boyutlu kuantum tellerine elektronik geçişi göstermektedir (Hu, Wang, Li, Yang, & Alivisatos, 2002).

G. Simons, H₂O ve HF nin valans elektron özelliklerini bir Pseudo potansiyeli modelini kullanarak hesaplamıştır. Hesaplanan geometriler, kuvvet sabitleri ve iyonizasyon potansiyelleri tüm elektronlara karşılık gelen hesaplama sonuçlarıyla mükemmel bir uyum içerisinde olduğunu tespit etmiştir (Simons, 1973).

G. Rezaei ve arkadaşları yakın zamanda düzgün bir manyetik alan etkisi altında bantlar arası geçişlerle ilgili kırılma indisi değişiklikleri ve optik soğurma katsayısı değişiklikleri üzerine teorik bir çalışma yapmışlardır. Pseudodot sisteminin elektronik yapısı tek bant etkin kütle yaklaşımı kullanılarak incelemelerinin yanı sıra yoğunluk matrisi yaklaşımı kullanılarak doğrusal ve doğrusal olmayan optiksel absorpsiyon katsayısı değişiklikleriyle kırılma indisi değişikliklerini hesaplamışlardır. Optiksel absorpsiyon katsayısı ve kırılma indisi değişimlerini, Pseudodot sisteminin boyutları ve manyetik alanın etkisinde incelemiştir. Absorpsiyon katsayısı ve kırılma indisi değişimlerini sadece güçlü bir dış manyetik alanın değil aynı zamanda Pseudodot sisteminin geometrik boyutlarının da etkilediği bulunmuştur (Rezaei G. , Vaseghi, Taghizadeh, Vahdani, & Karimi, 2010).

R. Khordad dış bir manyetik alan etkisi altında, kuantum Pseudodot sisteminde doğrudan bant geçişleri üzerinde çalışmıştır. Kuantum Pseudodot sisteminin geometrik boyutu ve uygulanan manyetik alanın bir fonksiyonu olarak soğurma eşik frekansı ve soğurma katsayısı için ifadeler elde etmiştir. Yapılan çalışmada soğurma eşik frekansı üzerinde uygulanan manyetik alanın ve Pseudodot sisteminin boyutlarının önemli bir rolü olduğu belirlenmiştir (Khordad, 2010).

Wenfang Xie yakın zamanda bir kuantum Pseudodot sisteminin Raman saçılma özellikleri üzerinde inceleme yapmıştır. İki boyutlu Pseudodot sisteminde Raman elektron saçılmanı ele almıştır. Kesit farklılığının sistemin boyutundan ve uygulanan manyetik alandan etkilendiği belirlenmiştir. Daha büyük saçılma yoğunluklarının farklı potansiyeller altında elde edilebileceği belirtmiştir (Xie, Electron Raman scattering of a two-dimensional pseudodot system, 2012).

G. Rezaei düzgün bir manyetik alan etkisi altında iki boyutlu kuantum Pseudodot sistemlerinde bantlar arası geçişle ilgili optiksel rektifikasyon katsayısını teorik olarak incelemiştir. Bu bağlamda Pseudodot sisteminin optiksel rektifikasyon katsayısını

yoğunluk matrisi yaklaşımı ve iteratif metodunu kullanarak bulmuştur. Dış bir manyetik alan, geometrik boyutlar ve kimyasal potansiyelin etkisi altında Pseudodot sistemlerinde bu katsayı incelenmiştir. Optikselrektifikasyon katsayısının Pseudodot sisteminin kimyasal potansiyeli, geometrik boyutları ve dış bir manyetik alanın etkisiyle değiştiği bulunmuştur (Rezaei G. , Vaseghi, Khordad, & Azadi Kenary, 2011).

R. Schuster ve arkadaşları süper iletken bir filmde bir antidot örgüyle Shapiro basamaklarını incelemişlerdir. Sınırlı sayıda periyotlarda antidot örgüleri üretmişlerdir. Öyle ki toplam sistemin boyutu düşük sıcaklıklarda elektronların faz uyumu uzunluğundan çok küçüktür. Manyetik direnç klasik özdeş titreşimlerin yanı sıra tekrarlanabilir kuantum dalgalanmalarından baskındır. Aharanov – Bohm titreşiminin varlığı belirlenmiş ve klasik olarak yörüngeye tutturulmuş elektron varlığıyla ilişkilendirilmiştir (Schuster, Ensslin, Wharam, Kühn, & Kotthaus, 1994).

M. Kataoka, C. J. B. Ford ve arkadaşları Kuantum Hall Rejiminde bir antidot etrafında Coulomb elektriklenmesi üzerinde çalışmışlardır. Büyük bir B manyetik alanın fonksiyonu olarak iki boyutlu bir elektron gazında potansiyel tepesi (antidot) etrafındaki yüklerin titreşimleri belirlenmiştir. Kapalı yörüngelerde antidot etrafında alanla sınırlandırılan elektronlar söz konusu bölgede, Aharonov - Bohm etkisiyle kuantumlanmıştır. Artan manyetik alan her durumun alanını azaltır, elektronları merkeze yakın bölgelere iter, tünel dışına çıkan bir elektron için yeterli yük kurar. Bu elektrostatiksel sınırlı dotlarda görülen yeni bir Coulomb ablukası şeklindedir. DC geriliminde toplama ve uyarılma spektrumları Coulombblockade tünelini desteklemiştir (Kataoka, et al., 1999).

J. Reijniers ve F. M. Peeters manyetik bir antidotta kuantum durumları üzerinde çalışmıştır. İki boyutta homojen olmayan bir manyetik alanla sınırlandırılan elektronlardan oluşan bir sistem üzerinde çalışmışlardır. Sistem bir heteroyapıyla bunun üzerindeki bir süper iletken diskten oluşmaktadır. Sistemde yer alan elektronların dot bölgelerinde sınırlandırılabilmesi görülmüştür. Bu manyetik antidot ilginç özelliklere sahiptir, öyle ki dolu dotlar manyetik alanın kesikli bir fonksiyonudur. Bağlı durumların bazıları için dot içinde ve dışında elektron akışı ters yönde olabilir. Böyle durumlar manyetik alanın artmasıyla paramanyetik geçişe bir diyamantizma sergilemektedir (Reijniers, Peeters, & Matilus, 1999).

3. PSEUDODOT ÇÖZÜMLERİ

Bir boyutta Pseudo harmonik potansiyelinde hapsolmuş bir elektronun enerji özdeğerlerinin değişimini belirlemek için öncelikle Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Bütün küresel simetrik potansiyelerde açısız kısmın çözümü değişmediğinden ve kullandığımız Pseudo harmonik potansiyelinin açısız bağılı olmamasından dolayı yapacağımız hesaplamalar Schrödinger denkleminin radyal kısmı üzerinde yoğunlaşacaktır. Fakat açısız kısım da radyal kısmın yanı sıra ele alınacaktır. Bu potansiyelde hapsolan elektronun maksimum bulunabileceği yer r_0 noktalarının eksenleri kestiği yerdir. Çünkü burada potansiyel minimumdur ve dolayısıyla elektronumuzun burada bulunma ihtimali diğer potansiyel değerlerinden daha fazladır. Bu bilgiler ışığında bir boyutta Pseudo harmonik potansiyelinde hapsolan elektronun davranışını incelemeye başlayabiliriz.

3.1. BİR BOYUTLU PSEUDODOT ÇÖZÜMÜ VE ENERJİ SEVİYELERİ

Pseudo harmonik potansiyelde hapsolmuş m kütleli E enerjili bir parçacık için bir boyutlu Schrödinger denklemi yazılırsa;

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V_P(r)\psi = E\psi$$

Pseudo potansiyeli altındaki radyal denklem $\psi = R$ olmak üzere,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dx^2} + \underbrace{V_0\left(\frac{x}{x_0} - \frac{x_0}{x}\right)^2}_{\text{Pseudo Potansiyeli}} R = ER \quad (3.1.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dx^2} + V_0\left(\frac{x^2}{x_0^2} + \frac{x_0^2}{x} - 2\right)R - ER = 0 \quad (3.1.2)$$

Yukarıdaki denklemi düzenlemek adına eşitliğin her tarafını $-2m/\hbar^2$ ile çarpalım:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2 x_0^2} x^2 - \frac{2mV_0 x_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{x^2} + \frac{2m(E + 2V_0)}{\hbar^2} \right] R = 0 \quad (3.1.3)$$

Bu denklemin çözülebilmesi için denklemden yer alan x^2 ifadelerinin bir basamak indirgenmesi gerekmektedir. Bu durumda işlemlerimize yeni değişkenler tanımlayarak devam edeceğiz.

$$\rho = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar x_0} x^2 \leftrightarrow x^2 = \frac{\hbar x_0}{\sqrt{2mV_0}} \rho \leftrightarrow x = \sqrt{\frac{\hbar x_0}{\sqrt{2mV_0}}} \rho^{1/2} \quad (3.1.4)$$

Burada tanımlamış olduğumuz ρ değeri denkleminizi bir basamak indirgeyecektir. Bu değişken değişiminin Denklem (3.1.3) yerine yazılmasıyla;

$$\left[2 \sqrt{\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar x_0}} \rho^{1/2} \frac{d}{d\rho} \left(2 \sqrt{\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar x_0}} \rho^{1/2} \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{\hbar x_0}{\sqrt{2mV_0}} \rho - \frac{2mV_0 x_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{\frac{\hbar x_0}{\sqrt{2mV_0}} \rho} + \frac{2m(E + 2V_0)}{\hbar^2} \right] R = 0$$

Elde etmiş olduğumuz bu denklemden gerekli düzenlemeler yapıp, denklemin her tarafını önce $\sqrt{2mV_0}/\hbar x_0$ ile ve daha sonra 4'e bölersek;

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{4} \left(\rho + \frac{2mV_0 x_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{\rho} - \sqrt{\frac{2m x_0^2}{\hbar^2 V_0}} (E + 2V_0) \right) \right] R = 0 \quad (3.1.5)$$

Şimdiye bulduğumuz denklemi boyutsuz hale getirmek için bazı sabitler tanımlayarak işlemlerimize devam edeceğiz.

$$\alpha_{1D} = \sqrt{\frac{2m x_0^2}{\hbar^2 V_0}} (E + 2V_0) \quad \text{ve} \quad \beta_{1D} = \frac{2mV_0 x_0^2}{\hbar^2}$$

O halde boyutsuz indirgenmiş denklem,

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} + \frac{\alpha_{1D}}{4} - \frac{\beta_{1D}}{4\rho} - \frac{\rho}{4} \right] R = 0 \quad (3.1.6)$$

halini alır. Bundan sonra elde edilmiş olan indirgenmiş denklemin asimptotik davranışını, daha öncede bir boyutlu harmoniksahinıcı probleminin çözümünde de değinildiđi gibi uzun limit ve kısa limitlerde ele almak faydalı olacaktır.

- Uzun limitte davranış için ($\rho \rightarrow \infty$);

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\rho}{4} \right] R = 0 \quad (3.1.7.a)$$

halini alır. Bu denklemin çözümü, $R = e^{-\rho/2}$ dir.

- Kısa limitte davranış için ($\rho \rightarrow 0$);

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} - \frac{\beta_{1D}}{4\rho} \right] R = 0 \quad (3.1.7.b)$$

Şekline gelir ki, bu denkleme $R = \rho^\mu$ gibi bir çözüm önerilirse ve bu ifadenin türevleri alınıp üst denklemde yazılırsa denklem sistemimizi sağlayan μ değeri tespit edilmiş olur. Burada bilmemiz gereken başka bir hususta bulunacak olan μ değerinin pozitif bir sayı olması gerektiğidir.

$$\left[\mu(\mu - 1) + \frac{1}{2}\mu - \frac{\beta_{1D}}{4} \right] = 0$$

Bu denklemin kökleri ikinci dereceden denklemlerin çözümünden kolayca hesaplanabilir. Bu sonucu veren denklem kökü de;

$$\mu = \frac{1}{4} (1 + \sqrt{1 + 4\beta_{1D}})$$

değeri dir. μ 'nün değerini de tayin edildikten sonra indirgenmiş denklemini sağlayan fonksiyonu şu şekilde tanımlarız:

$$R = \rho^\mu e^{-\rho/2} u(\rho) \quad (3.1.7.c)$$

Şimdi bulunmuş olan Denklem (3.1.7.c)'nin gerekli türevleri alınarak;

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} + \frac{\alpha_{1D}}{4} - \frac{\beta_{1D}}{4\rho} - \frac{\rho}{4} \right] R = 0 \quad (3.1.8)$$

$$\frac{dR}{d\rho} = \mu \rho^{\mu-1} e^{-\rho/2} u(\rho) - \frac{1}{2} \rho^\mu e^{-\rho/2} u(\rho) + \rho^\mu e^{-\rho/2} u'(\rho)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{d\rho^2} &= \mu(\mu-1) \rho^{\mu-2} e^{-\rho/2} u(\rho) - \frac{\mu}{2} \rho^{\mu-1} e^{-\rho/2} u(\rho) + \mu \rho^{\mu-1} e^{-\rho/2} u'(\rho) \\ &\quad - \frac{\mu}{2} \rho^{\mu-1} e^{-\rho/2} u(\rho) + \frac{1}{4} \rho^\mu e^{-\rho/2} u(\rho) - \frac{1}{2} \rho^\mu e^{-\rho/2} u'(\rho) \\ &\quad + \mu \rho^{\mu-1} e^{-\rho/2} u'(\rho) - \frac{1}{2} \rho^\mu e^{-\rho/2} u'(\rho) + \rho^\mu e^{-\rho/2} u''(\rho) \end{aligned}$$

Denklem (3.1.8)'de yerine yazılırsa:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left(2\mu + \frac{1}{2} - \rho \right) \frac{du(\rho)}{d\rho} \\ + \left(\frac{\mu^2}{2} - \frac{\mu}{\rho} - \frac{\mu}{2} - \frac{\mu}{2} + \frac{\rho}{4} + \frac{\alpha_1}{4} - \frac{\rho}{4} - \frac{\beta_1}{4\rho} + \frac{\mu}{2\rho} - \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0 \end{aligned}$$

Daha sonra gerekli sadeleştirmeler yapılırsa;

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left(2\mu + \frac{1}{2} - \rho \right) \frac{du(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\mu^2 - \frac{\mu}{2} - \frac{\beta_{1D}}{4}}{\rho} + \frac{\alpha_{1D}}{4} - \mu - \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0 \quad (3.1.9)$$

Denklem (3.1.9) elde edilir. Buda bağlı Laguerre (Associated Laguerre) diferansiyel denklemdir, bunu daha iyi görebilmek için

$$\gamma_{1D} = 2\mu - \frac{1}{2}$$

kısaltmasını yapalım. Denklem (3.1.9)

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} + (\gamma_{1D} + 1 - \rho) \frac{du(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\mu^2 - \frac{\mu}{2} - \frac{\beta_{1D}}{4}}{\rho} + \frac{\alpha_{1D}}{4} - \mu - \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0 \quad (3.1.10)$$

şekline dönüşür.

Bu denklemde μ parametresi bir boyutta sabit bir değere sahiptir. Daha öncede belirtilmiş olarak, bu parametrenin pozitif olması gerektiği unutulmamalıdır. Şimdi bu bilgilerimizden yola çıkarak Denklem (3.1.10)'da μ değeri yerine konulursa

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} + (\gamma_{1D} + 1 - \rho) \frac{du(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\alpha_{1D}}{4} - \mu - \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0 \quad (3.1.11)$$

haline gelir ki, bu denklem tam olarak bir Laguerre diferansiyel denklemidir. Burada γ_1 , β_1 ve μ parametreleri pozitif birer reel sayılardır. Şimdi μ değişim aralığını belirleyerek bu parametrelerin değişim aralığı belirlenebilir:

$$\beta_{1D} = \mu(4\mu - 2) > 0$$

olmalıdır. Bu eşitsizliğin köklerine bakıldığında β_{1D} parametresinin anlamlı olduğu μ aralığı,

$$\mu = \left(\frac{1}{2}, \infty \right]$$

şeklindedir. Bu aralıktaki μ değerlerinden β_{1D} ve γ_{1D} parametrelerinin minimum alabileceği değerler kolayca saptanabilir.

Denklem (3.1.11)'de

$$n = \frac{\alpha_{1D} - 1}{4} - \mu$$

Şeklinde bir kısaltma daha yapmak gereklidir. Burada tanımlanan n parametresi tamsayı olmak zorundadır çünkü bu bağlı Laguerre diferansiyel denkleminin çözümünden gelen bir şarttır. Bu kısaltmadan sonra (3.1.11) diferansiyel denklemi

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} + (\gamma_{1D} + 1 - \rho) \frac{du(\rho)}{d\rho} + nu(\rho) = 0 \quad (3.1.12)$$

halinde yazılır. Bu diferansiyel denklemin çözümü bağlı Laguerre polinomlarıdır ve $L_n^{\gamma_{1D}}$ şeklinde gösterilir. Diferansiyel denklemin çözümüne bakmadan önce daha evvel tanımlanan

$$\alpha_{1D} = \sqrt{\frac{2mx_0^2}{\hbar^2 V_0}} (E + 2V_0)$$

yardımıyla enerji belirlenebilir. γ_{1D} ifadesinde yer alan μ değeriyle çekilip n ifadesinde yerine yazılırsa;

$$\alpha_{1D} = 4 \left(n + \frac{\gamma_{1D} + 1}{2} \right) = \sqrt{\frac{2mx_0^2}{\hbar^2 V_0}} (E + 2V_0)$$

şeklinde bir eşitlik elde edilir. Bu eşitlikten enerji ifadesi çekilirse;

$$E_n = \hbar \left(\frac{8V_0}{mx_0^2} \right)^{1/2} \left(n + \frac{\gamma_{1D} + 1}{2} \right) - 2V_0 \quad (3.1.13)$$

olarak bulunur. Burada enerji ifadesinin değişimini n ve γ_1 parametrelerine bağlamış bulunmaktadır. Bu parametrelerin daha önce tanımlı değerleri yerlerine yazılarak n , β_1 ve μ ye bağlı bir enerji ifadesi de isteğe göre türetilebilir. Görüldüğü gibi kuantumlu enerji özdeğerinin değişimi n ve γ_1 parametrelerinin değişimiyle anlam kazanmaktadır. Burada n parametresinin bir tamsayı olması gerektiği daha önce belirtilmiş olmakla birlikte, aslında diferansiyel denklemin çözümünden gelen bir zorunluluktur. Denklem (3.1.12) bağlı Laguerre diferansiyel denklemdir ve çözümü $u(\rho) = L(\rho)$ şeklinde gösterilirse,

$$\frac{d^2 L(\rho)}{d\rho^2} + (\gamma_{1D} + 1 - \rho) \frac{dL(\rho)}{d\rho} + nL(\rho) = 0 \quad (3.1.14)$$

Bu denklemin çözümü için

$$L(\rho) = c_0 + c_1\rho + c_2\rho^2 + \dots = \sum_{m=0} c_m \rho^m$$

şeklinde bir kuvvet serisi önerilerek gerekli türevler alınabilir.

$$\frac{dL}{d\rho} = c_1 + 2c_2\rho + 3c_3\rho^2 + \dots = \sum_m (m+1)c_{m+1}\rho^m$$

$$\rho \frac{dL}{d\rho} = c_1\rho + 2c_2\rho^2 + 3c_3\rho^3 + \dots = \sum_m mc_m\rho^m$$

Ve bu ifadeler Denklem (3.1.14) yazılırsa n parametresinin bir tamsayı olması gerektiği görülecektir. Bu konu üzerinde daha önce Hidrojen atomu probleminin enerji özdeğerleri hesaplanırken durulduğundan dolayı detaya inilmemiştir. Bir boyutlu uygulamalarda γ_{1D} , β_{1D} ve μ parametrelerinin reel sayılar olduğu unutulmamalıdır. Bir boyutta Pseudo harmonik potansiyeli altında Schrödinger dalga denkleminin çözümünü bu şekilde tamamlamış oluyoruz.

Sistemi temsil eden dalga fonksiyonlarını belirlemek için daha önce tanımladığımız radyal fonksiyonu ve bazı değişkenleri tekrar hatırlayalım:

$$\psi(\rho) = \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho)$$

$$r = \left(\frac{\hbar^2 x_0^2}{2mV_0} \right)^{1/4} \rho^{1/2} \quad \text{buradan} \quad A^2 = \left(\frac{\hbar^2 x_0^2}{2mV_0} \right)^{1/4}$$

Kısaltmaları yapılırsa

$$x = A^2 \rho^{1/2} \quad \leftrightarrow \quad dx = \frac{|A|^2}{2} \rho^{-1/2}$$

şeklinde yazılabilir.

$$\gamma_{1D} = 2\mu - \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad \mu = \frac{\gamma_{1D}}{2} + \frac{1}{4}$$

Dalga fonksiyonunun normalizasyonu için:

$$|N|^2 = \int_0^\infty \psi(x)\psi(x)^* dx$$

ifadesinde $\psi(x)$ yerine yazılmadan önce işlemleri ρ değişkeni üzerinden yazmak kolaylık sağlar.

$$|N|^2 = \frac{|A|^2}{2} \int_0^\infty \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho) \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho) \rho^{-1/2} d\rho \quad (3.1.15)$$

olur ve gerekli ara işlemler yapılırsa;

$$|N|^2 = \frac{|A|^2}{2} \int_0^{\infty} \rho^{\gamma_{1D}} \rho^{1/2} e^{-\rho} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho) \rho^{\mu} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho) \rho^{-1/2} d\rho$$

şeklinde bir ifade elde edilir. Buradan Laguerre polinomlarının diklik bağıntısından yararlanarak

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{\alpha} L_n^{\alpha}(\rho) L_n^{\alpha}(\rho) d\rho = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} \quad (3.1.16)$$

normlama sabiti

$$|N|^2 = \frac{|A|^2}{2} \int_0^{\infty} \rho^{\gamma_{1D}} e^{-\rho} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho) L_n^{\gamma_{1D}}(\rho) d\rho = \frac{|A|^2 \Gamma(n + \gamma_{1D} + 1)}{2 n!} \quad (3.1.20)$$

$$|N| = A \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{1D} + 1)}{2n!}} \quad (3.1.21)$$

elde edilir.

Bir boyutta normlu dalga fonksiyonumuz:

$$\psi = \frac{\rho^{\mu} e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{1D}}(\rho)}{A \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{1D} + 1)}{2n!}}} \quad (3.1.22)$$

şeklinde bulunur.

3.2. İKİ BOYUTLU PSEUDODOT ÇÖZÜMÜ VE ENERJİ SEVİYELERİ

Bir boyutta Pseudo harmonik Potansiyeli altında Schrödinger denkleminin çözümünde kullanılan yöntemlerin aynısı iki ve üç boyutlu uygulamalarda da kullanılacaktır. Bundan dolayı bu uygulamaların analizindeki denklem çözümlerinin detaylarına inilmeyecektir. Farklılık gösteren temel şeyin boyutlara göre $\vec{\nabla}$ operatörü olduğuna dikkat etmekte yarar var. İlk olarak iki boyutta Pseudo harmonik potansiyeli altındaki Schrödinger denklemi $\psi(r, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi)$ olmak üzere

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi \quad (3.2.1)$$

şeklinde tanımlıdır.

Bu ifadeye radyal denklem,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m(E + 2V_0)}{\hbar^2} - \left(\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} - m^2 \right) \frac{1}{r^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2 r_0^2} r^2 \right] R = 0 \quad (3.2.2)$$

haline dönüşür. Burada açısıl kısmın çözümünden gelen m manyetik kuantum sayısına dikkat ediniz.

Daha önce bir boyutlu uygulamada yapıldığı gibi diferansiyel denklemi daha çözülebilir bir hale getirmek için yeni bir değişken tanımlı yapırsa;

$$\rho = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar r_0} r^2 \quad \leftrightarrow \quad r = \sqrt{\frac{\hbar r_0}{\sqrt{2mV_0}}} \rho^{1/2} \quad (3.2.3)$$

$$\frac{d}{dr} = \frac{\partial \rho}{\partial r} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \quad \leftrightarrow \quad \frac{d}{dr} = \frac{2\sqrt{2mV_0}}{\hbar r_0} \cdot r \frac{d}{d\rho} \quad \leftrightarrow \quad \frac{d}{dr} = 2 \sqrt{\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar r_0}} \rho^{1/2} \frac{d}{d\rho} \quad (3.2.4)$$

Ve bu değişken Denklem (3.2.2)'de yerine yazılırsa, Denklem (3.2.2);

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} + \sqrt{\frac{2mr_0^2}{\hbar^2 V_0}} \frac{(E + 2V_0)}{4} - \left(\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} - m^2 \right) \frac{1}{4\rho} - \frac{\rho}{4} \right] R = 0 \quad (3.2.5)$$

şekline dönüşür. Burada bir boyutlu kuantum Pseudodot yapısında olduğu gibi bazı sabitler tanımlayarak diferansiyel denklem boyutsuz hale getirilir.

$$\alpha_{2D} = \sqrt{\frac{2mr_0^2}{\hbar^2 V_0}} (E + 2V_0) \quad \text{ve} \quad \beta_{2D} = \frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2} - m^2$$

Artık diferansiyel denklem daha sade bir formda yazılabilir.

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} + \frac{\alpha_{2D}}{4} - \frac{\beta_{2D}}{4\rho} - \frac{\rho}{4} \right] R = 0 \quad (3.2.6)$$

Elde edilen diferansiyel denklem, bir boyutta olduğu gibi uzun, kısa ve ara limitlerde ele alınacaktır. Daha önce bir boyutlu uygulamalarda bu konuya değinildiğinden direk elde edilecek sonuçlar üzerinde durulacaktır:

- Uzun limitte $\rho \rightarrow \infty$ için baskın terimler yazılacak olursa, diferansiyel denklem

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\rho}{4} \right] R = 0 \quad (3.2.6.a)$$

haline indirgenir. Bunun çözümü de,

$$R(\rho) = e^{-\rho/2}$$

olarak direkt yazılabilir.

- Kısa limitte $\rho \rightarrow 0$ için çözüm, diferansiyel denklemin baskın terimleri yazılırsa

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} - \frac{\beta_{2D}}{4\rho} \right] R = 0 \quad (3.2.6.b)$$

haline dönüşür. Burada $R(\rho) = \rho^\mu$ gibi bir çözüm önererek μ parametresinin değerini tayin edilir, böylece μ değeri:

$$\mu = \frac{\beta_{2D}}{2}$$

bulunur. Böylece tüm bölgelerde kabul gören çözüm,

$$R(\rho) = \rho^\mu e^{-\rho/2} u(\rho) \quad (3.2.6.c)$$

şeklinde daha önce bir boyutlu uygulamada elde edildiği gibi bulunmuş olur.

Şimdide bulunan bu radyal dalga fonksiyonu Denklem (3.2.6)'da kullanılarak $u(\rho)$ için aranılır. Bir boyutlu uygulamanın çözümünde bahsedildiği üzere μ parametresinin pozitif olması gereklidir, dolayısıyla buda doğrudan β parametresinin pozitif olması anlamına gelir.

Bulunan μ değerinin daha sonra doğrulanması gerektiğine dikkat edilmelidir. Aksi takdirde yapılan işlemlerde bir hata söz konusudur. Denklem (3.2.6.c) elde edilen radyal dalga fonksiyonunun uygun işlem göreceğ olan türevleri alınırsa;

$$\frac{dR}{d\rho} = \mu\rho^{\mu-1}e^{-\rho/2}u(\rho) - \frac{1}{2}\rho^{\mu}e^{-\rho/2}u(\rho) + \rho^{\mu}e^{-\rho/2}u'(\rho)$$

Elde edilen bu ifadeler yerine yazıldığında Denklem (3.2.6);

$$\left[\rho \frac{d^2u}{d\rho^2} + (2\mu + 1 - \rho) \frac{du}{d\rho} + \left(\frac{\mu^2 - \beta_{2D}/4}{\rho} - \mu + \frac{\alpha_{2D} - 2}{4} \right) u = 0 \right] \quad (3.2.7)$$

Haline dönüşür ki, bunun da bağlı Laguerre polinomu olduğu görülmektedir.

Burada $\mu^2 - \beta_{2D}/4 = 0$ olduğuna dikkat ediniz. Bu denklemin pozitif kökü daha önce bulunan μ değerini doğrulamaktadır. Dolayısıyla yapılan işlemlerin güvenilirliği test edilmiş olunur. Burada Denklem (3.2.7) bağlı Laguerre polinomudur ve bunun daha açık görülebilmesi adına yeni sabitler tanımlamaya gerek vardır:

$$n = \frac{\alpha_{2D} - 2}{4} - \mu \quad 2\mu = \gamma_{2D}$$

Tanımlanan bu sabitler (3.2.7) denkleminde yerine yazıldığında,

$$\left[\rho \frac{d^2u}{d\rho^2} + (2\mu + 1 - \rho) \frac{du}{d\rho} + nu = 0 \right] \quad (3.2.8)$$

görüldüğü gibi bağlı Laguerre polinomu açıkça görülmektedir. Laguerre polinomlarının özelliklerinden faydalanarak devam edilirse,

$$\left[\rho \frac{d^2u}{d\rho^2} + (\gamma_{2D} + 1 - \rho) \frac{du}{d\rho} + nu = 0 \right] \quad (3.2.9)$$

Burada n parametresinin neden bir tamsayı olması gerektiği bir boyutlu Pseudodot yapısında belirtilmiştir. Bunun yanı sıra γ_{2D} , μ ve β_{2D} parametrelerinin pozitif olması gerektiği unutulmamalıdır. İki boyutlu uygulamalarda ara işlemlere girilirse; $\beta_{2D} = \gamma_{2D}$ olduğu da görülür.

Enerji özdeğerleri için bir çözüm bulmak üzere daha önce tanımlanan,

$$\frac{\gamma_{2D}}{2} = \frac{\alpha_{2D} - 2 - 4n}{4} \quad \leftrightarrow \quad \alpha_{2D} = 2\gamma_{2D} + 4n + 2 = 4\left(n + \frac{\gamma_{2D} + 1}{2}\right) = 4\left(n + \frac{\beta_{2D} + 1}{2}\right)$$

denklemlerde matematiksel işlemler yapılarak

$$\alpha_{2D} = \sqrt{\frac{2mr_0^2}{\hbar^2 V_0}} (E + 2V_0) = 4\left(n + \frac{\beta_{2D} + 1}{2}\right) \quad (3.2.11)$$

elde edilen Denklem (3.2.11)'den E ifadesi çekilecek olursa;

$$E_n = \hbar \left(\frac{8V_0}{mr_0^2}\right)^{1/2} \left(n + \frac{\beta_{2D} + 1}{2}\right) - 2V_0 \quad (3.2.12)$$

Denklem (3.2.12) ile verilen enerji özdeğeri elde edilir.

Böylece iki boyutta Pseudo harmonik potansiyelinde hapsolmuş m kütleli ve E enerjili bir elektron için Schrödinger dalga denkleminin çözümü tamamlanmış olup n ve γ_{2D} ye bağlı enerji öz değerlerinin değişimini belirleyen bir ifade türetilmiş olunur. Burada enerji özdeğerlerinin değişimi görüldüğü üzere n ve β_{2D} parametresine bağlıdır. Diğer bütün parametreler birer sabittir ve deneysel olarak değiştirilmeleriyle anlam kazanırlar.

Burada bulunan enerji özdeğerlerinin türetilmesine olanak sağlayan parametrenin, bir boyutlu uygulamada elde ettiğimiz sonuçla aynı olduğu görülmektedir. Farklılığı yaratan parametre ise kesinlikle γ_{2D} ifadesidir ve $\gamma_{1D} \neq \gamma_{2D}$ olduğu problem dikkatli incelenirse kolayca görülecektir. Bir ve iki boyutlu Pseudodot uygulamalarında enerjiyi belirleyen diğer tüm parametreler özdeş alınsa dahi bu ikisi farklı bir sonuç vererek karşımıza çıkacaktır. Görüldüğü üzere bir ve iki boyutlu uygulamalarda herhangi bir dejenerelikte söz konusu değildir. Böylece iki boyutta Schrödinger denklemini Pseudo potansiyeli altında çözüme tabi tutularak, bir elektron için enerji ifadesi türetilmiş bulunmaktadır.

Şimdi iki boyutta kuantum Pseudopot yapısında açısız kısma bağılı çözüme de değinerek genel dalga fonksiyonumuzu normlama işleme başlanılabılır. İki boyutta dalga fonksiyonunun hem radyal hem de açısız bileşenleri mevcuttur. Bunlar sırayla ele alınıp normlu dalga fonksiyonu için genel bir çözüml bulunacaktır. Bir boyutlu uygulamalarda arka arkaya verilmiş olan bütün dönüşümler burada da geçerlidir. Bu bağlamda tekrar bu ifadeleri yinelemeye gerek yoktur. Bir boyutta radyal kısmın çözümlünden farklı olarak bir değışim gösteren γ_{2D} parametresidir.

$$\psi = R(r)\Phi(\varphi)$$

$$\gamma_{2D} = 2\mu \quad \leftrightarrow \quad \mu = \frac{\gamma_{2D}}{2} \quad (3.2.12. a)$$

$$r = \left(\frac{\hbar^2 r_0^2}{2mV_0} \right)^{1/4} \rho^{1/2} \quad \leftrightarrow \quad A^2 = \left(\frac{\hbar^2 r_0^2}{2mV_0} \right)^{1/4} \quad (3.2.12. b)$$

Normlama ifadesini tanımlarsak;

$$|N|^2 = \int_0^\infty R(r)R(r)^* r dr \quad (3.2.13)$$

Uygun ifadeler (3.2.13) denkleminde yerine yazılırsa,

$$|N|^2 = \int_0^\infty \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{2D}}(\rho) \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{2D}}(\rho) |A|^2 \rho^{1/2} \frac{|A|^2}{2} \rho^{-1/2} d\rho \quad (3.2.14)$$

ve Laguerre polinomlarının diklik bağıntısı kullanılırsa normlama sabiti,

$$|N|^2 = \frac{|A|^4}{2} \int_0^\infty \rho^{\gamma_{2D}} e^{-\rho} L_n^{\gamma_{2D}}(\rho) L_n^{\gamma_{2D}}(\rho) d\rho = \frac{|A|^4}{2} \frac{\Gamma(n + \gamma_{2D} + 1)}{n!} \quad (3.2.15)$$

$$|N| = A^2 \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{2D} + 1)}{2n!}} \quad (3.2.16)$$

şeklinde bulunmuş olur. Böylece radyal kısım için normlu dalga fonksiyonu;

$$R(r) = \frac{\rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{2D}}(\rho)}{A^2 \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{2D} + 1)}{2n!}}} \quad (3.2.17)$$

elde edilmiş bulunur.

Şimdide açısai kısım için normlu ifade bulunmaya çalışılır. Açısai kısım dalga fonksiyonu;

$$Y(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (3.2.18)$$

şeklinde tanımlıdır. Bu ifade normlanacak olursak;

$$|N_\varphi|^2 = \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\varphi} d\varphi = 1 \quad (3.2.19)$$

Genel olarak normlu dalga fonksiyonu,

$$\psi = R(r)\Phi(\varphi)$$

şeklinde ifade edilir. Burada açısai kısmın normlanmasından gelen herhangi bir ifade olmadığından, en genel normlu dalga fonksiyonu;

$$\psi_{n,m} = R(r)\Phi(\varphi) = \frac{1}{A^2 \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{2D} + 1)}{4\pi n!}}} \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{2D}}(\rho) e^{im\varphi} \quad (3.2.20)$$

olmak durumundadır.

3.3. ÜÇ BOYUTLU PSEUDODOT ÇÖZÜMÜ VE ENERJİ SEVİYELERİ

Üç boyutta Pseudo harmonik potansiyelde hapsolan bir parçacığın Schrödinger denklemi;

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (3.3.1)$$

Pseudo harmonik potansiyeli Denklem (3.3.1)'de yerine yazılırsa;

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E - V_0 \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 2 + \frac{r_0^2}{r^2} \right) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (3.3.2)$$

Buradan boyutsuz ρ değişkenine geçilirse,

$$\rho = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar r_0} r^2 \quad \leftrightarrow \quad r = \sqrt{\frac{\hbar r_0}{\sqrt{2mV_0}}} \rho^{1/2} \quad (3.3.3)$$

ve Denklem (3.3.2)'de bu ρ değişken kullanılırsa;

$$\left[\rho \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{3}{2} \frac{dR}{d\rho} \right] + \frac{1}{4} \left[\sqrt{\frac{2mr_0^2}{V_0 \hbar^2}} (E + 2V_0) - \rho - \frac{l(l+1) + \frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}}{\rho} \right] R = 0 \quad (3.3.4)$$

haline gelir. Burada denklemi basitleştirmek için,

$$\alpha_{3D} = \sqrt{\frac{2mr_0^2}{V_0 \hbar^2}} (E + 2V_0) \quad \text{ve} \quad \beta_{3D} = l(l+1) + \frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}$$

Şeklinde iki kısaltma yapılırsa, Denklem (3.3.4)'deki diferansiyel denklem

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{3}{2} \frac{d}{d\rho} + \frac{\alpha_{3D}}{4} - \frac{\rho}{4} - \frac{\beta_{3D}}{4} \right] R = 0 \quad (3.3.5)$$

haline indirgenir. Bir ve iki boyutlu uygulamalarda gerekli ara işlemler verildiğinden dolayı detaylı işlemlere girilmeyecektir. Yapılacak işlemler Denklem (3.3.5) 'in denkleminin asimptotik davranışını uzun ve kısa limitlerde belirledikten sonra tüm bölgelerde geçerli bir çözüm aramaktır.

Uzun limitte davranış için ($\rho \rightarrow \infty$);

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \right] R = 0 \quad (3.3.6. a)$$

Bu diferansiyel denklemin çözümü bilindiği gibi $R = e^{-\rho/2}$ şeklindedir.

Kısa limitte davranış için ($\rho \rightarrow 0$),

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{3}{2} \frac{d}{d\rho} - \frac{\beta_{3D}}{4} \right] R = 0 \quad (3.3.6. b)$$

olur. Bu denkleme $R = \rho^\mu$ gibi bir çözüm önerirsek,

$$\left[\mu(\mu - 1) + \frac{3}{2}\mu - \frac{\beta_{3D}}{4} \right] = 0 \quad (3.3.7)$$

Buradan μ parametresinin değeri;

$$\mu = \frac{1}{4}(\sqrt{4\beta_{3D} + 1} - 1) \quad (3.3.8)$$

şeklinde elde edilir. μ 'nün pozitif olması gerektiği tartışması daha önce yapıldığından burada pozitif olan çözüm alınmıştır. Böylece tüm bölgede geçerli olan bir çözüm

$$R(\rho) = \rho^\mu e^{-\rho/2} u(\rho)$$

Şeklinde olmalıdır. Bu gerekli türevleri alınıp Denklem (3.3.5)'de yerine yazılırsa;

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \left(2\mu + \frac{3}{2} - \rho \right) \frac{d}{d\rho} + \left(\frac{\mu^2 + \frac{\mu}{2} - \frac{\beta_{3D}}{4}}{\rho} - \mu + \frac{\alpha_{3D} - 3}{4} \right) \right] u(\rho) = 0 \quad (3.3.9)$$

ifadesi elde edilir. Basitleştirmek için;

$$\gamma_{3D} = 2\mu + \frac{1}{2} \quad \text{ve} \quad n = \frac{\alpha_{3D} - 3}{4} - \mu$$

kısaltmaları kullanıldığında

$$\left[\rho \frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + (\gamma_{3D} + 1 - \rho) \frac{du(\rho)}{d\rho} + nu(\rho) \right] = 0 \quad (3.3.10)$$

diferansiyel denkleminde ulařılır. Bu diferansiyel denklem baęlı Laguerre diferansiyel denklemdir ve czm $L_n^{Y_{3D}}$ Őekline gsterilen baęlı Laguerre polinomlarıdır.

c boyutta Pseudo harmonik potansiyelde hapsolmuř paracıęın dalga fonksiyonunu belirlemeden nce Denklem (3.3.9) ve (3.3.10) karřılařtırılarak elde edilecek olan n tamsayısının tanımından yararlanarak enerji zdeęerleri elde edilebilir.

$$\frac{2Y_{3D} - 1}{4} = \frac{\alpha_{3D} - 3 - 4n}{4} \quad \leftrightarrow \quad \alpha_{3D} = 4 \left(\frac{Y_{3D} + 1}{2} + n \right) \quad (3.3.11)$$

Daha nce tanımlanan α_{3D} ifadesi yerine yazılırsa

$$\alpha_{3D} = 4 \left(\frac{Y_{3D} + 1}{2} + n \right) = \sqrt{\frac{2mr_0^2}{V_0\hbar^2}} (E + 2V_0) \quad (3.3.12)$$

Hem n hem de l tamsayısına baęlı olan $E_{n,l}$ enerjisi

$$E_{n,l} = \hbar \left(\frac{8V_0}{mr_0^2} \right)^{1/2} \left(\frac{Y_{3D} + 1}{2} + n \right) - 2V_0 \quad (3.3.13)$$

elde edilir. Bu nedenle parametreleri ilk tanımlanan Őekliyle yerlerine yazarsak,

$$E_{n,l} = \hbar \left(\frac{V_0}{2mr_0^2} \right)^{1/2} \left(\sqrt{(2l + 1)^2 + \frac{8mV_0r_0^2}{\hbar^2}} + 4n + 2 \right) - 2V_0 \quad (3.3.14)$$

Grldę gibi, burada enerjinin yrnge kuantum sayısına baęlı olduęu aıktır. Dikkat edilecek olursa bir ve iki boyutta byle bir durum sz konusu deęildi. Fakat c boyutta iřin iine yrnge kuantum sayısı da girmiř bulunuyor. Bylece bir, iki ve c boyutta radyal Schrdinger denklemini Pseudo potansiyeli altında ele almıř bulunuyoruz. Bu potansiyelde bulunan bir elektron iin olası enerji zdeęerlerinin nasıl bir deęiřim sergileyeceęi de aıklıęa kavuřturulmuř bulunmaktadır. Őimdi bu potansiyelde yer alan paracıęa eřlik eden dalga fonksiyonunun ne olduęunu arařtıralım.

c boyutta dalga fonksiyonunun, iki boyutta olduęu gibi hem radyal hem de aısal kısıma baęlı bileřenleri mevcuttur. İki boyuttaki uygulamaya benzer olarak, radyal ve

açısal kısımlardan gelen normlu fonksiyonları bulmak üzere işlem yürütülmelidir. Normlama işlemine radyal kısımdan başlayacağız. Açısal kısmın normlanması Hidrojen atomu probleminin bir parçasıdır. Bu sebeple problemin çözümünden elde edilmiş ifade kullanılacaktır. Aşağıda verilen kısaltmalar daha sonra işlemlerde kullanılmak üzere,

$$\gamma_{3D} = 2\mu + \frac{1}{2} \quad \leftrightarrow \quad \mu = \frac{\gamma_{3D}}{2} - \frac{1}{4}$$

$$r = \left(\frac{\hbar^2 r_0^2}{2mV_0} \right)^{1/4} \rho^{1/2} \quad \leftrightarrow \quad A^2 = \left(\frac{\hbar^2 r_0^2}{2mV_0} \right)^{1/4}$$

Normlama ifadesi tanımlanacak olursa;

$$|N|^2 = \int_0^{\infty} \psi(r)\psi(r)^* r^2 dr \quad (3.3.18)$$

gerekli ifadeler yerine yazılıp işlemler sürdürülürse,

$$|N|^2 = \int_0^{\infty} \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) \rho^\mu e^{-\rho/2} L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) |A|^4 \rho \frac{|A|^2}{2} \rho^{-1/2} d\rho \quad (3.3.19)$$

$$|N|^2 = \frac{|A|^6}{2} \int_0^{\infty} \rho^{2\mu} e^{-\rho} L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) \rho^{1/2} d\rho$$

Laguerre polinomlarının diklik bağıntısı yardımıyla normlama sabiti,

$$|N|^2 = \frac{|A|^6}{2} \int_0^{\infty} \rho^{\gamma_{3D}} e^{-\rho} L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) d\rho = \frac{|A|^6}{2} \frac{\Gamma(n + \gamma_{3D} + 1)}{n!} \quad (3.3.20)$$

$$|N| = |A|^3 \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{3D} + 1)}{2n!}} \quad (3.3.21)$$

elde edilmiş olur.

Böylece radyal kısım dalga fonksiyonu normlama işlemi bitmiş olur. Şimdide açısal kısım dalga fonksiyonunun normu incelenebilir. Açısal kısım dalga fonksiyonu;

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (3.3.22)$$

şeklindedir.

Bu dalga fonksiyonu normlanacak olursa;

$$N_{lm} = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} \quad (3.3.23)$$

elde edilmiş olur. En genel normlu dalga fonksiyonu yazılacak olursa;

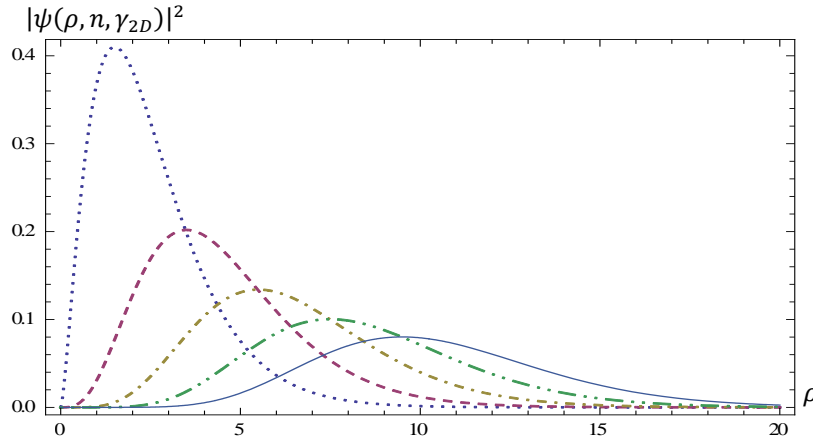
$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{N_{lm}}{|A|^3 \sqrt{\frac{\Gamma(n + \gamma_{3D} + 1)}{4n!}}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \rho^{\gamma_{3D}} e^{-\rho} L_n^{\gamma_{3D}}(\rho) \quad (3.3.24)$$

elde edilmiş olur.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu kısımda yapılan çalışma sonucunda elde edilen verilerin nümerik analiziyle ilgilenilecektir. Temelde Pseudo harmonik potansiyelde hapsolan bir parçacığın bulunabileceği yerler hakkında bir yorum yapmakla birlikte, kuantumlu enerji seviyelerinin değişimi üzerinde durulacaktır.

İlk olarak bir boyutlu Pseudopot çözümleri ele alınırsa; Şekil 3'de ρ konum parametresine bağlı olarak parçacığın bulunma olasılıkları gösterilmiştir. ρ 'nun çok küçük değerleri için ($\rho \rightarrow 0$) bu olasılık sıfır olurken, belli bir değerde maksimum olana kadar artmaktadır. Bu maksimum değerden daha büyük değerlerde parçacığın bulunma olasılığı hızla azalmakta ve çok büyük değerlerde sıfıra düşmektedir.

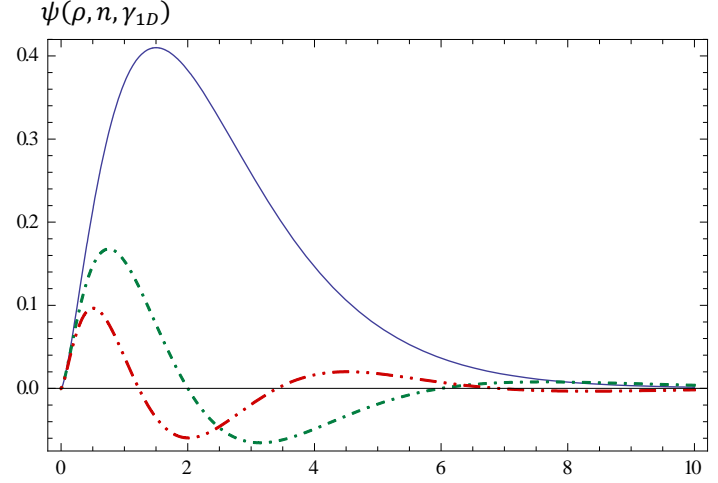


Şekil 3: Bir Boyutta, Taban Durumunda Pseudo harmonik Potansiyelde Bulunan Bir Parçacığın Bulunma Olasılığı

Ayrıca, Şekil 3 incelendiğinde; taban durumunda γ_{1D} parametresinin artan değerleri için, parçacığın bulunma olasılığının nasıl bir değişim sergilediği gösterilmiştir. Artan γ_{1D} değerleriyle parçacığın maksimum bulunabileceği yerlerde değişim meydana gelmektedir. Burada $\gamma_{1D} = 2, 4, 6, 8, 10$ gibi değerler aldığı anda parçacığın bulunma olasılığının maksimum olduğu yerler yani $|\psi(\rho, n, \gamma_{1D})|^2$ ninmaksimum değerlerinin azaldığı, buna rağmen parçacığın maksimum olasılıkla bulunduğu ρ değerinin arttığı görülmektedir. Bundan çıkarılacak sonuç, artan γ_{1D} parametresi bir parçacığın bulunma olasılığını belirleyen aralığın genişlemesine neden olmaktadır. Yani parçacığın salınım yaptığı aralık genişler. Dolayısıyla γ_{1D} nin artışı, parçacık konumundaki belirsizliğin artmasına neden olmaktadır. γ_{1D} parametresinin mümkün olan en düşük değerinde parçacık maksimum

bulunabileceği konumda yer almaktadır. Ki bu da Pseudo potansiyeli içerisinde x_0 konumuna işaret etmektedir.

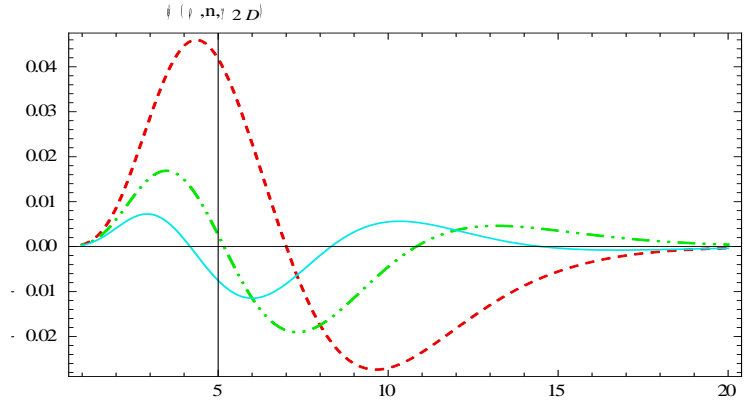
İkinci olarak, γ_{1D} parametresi sabit bir değerde iken, temel kuantum sayısının artmasıyla dalga fonksiyonunun nasıl değiştiği ele alınmıştır. Şekil 4’de artan ρ değerine karşı, farklı n (temel kuantum sayısı) değerlerinde dalga fonksiyonunun grafiği gösterilmiştir.



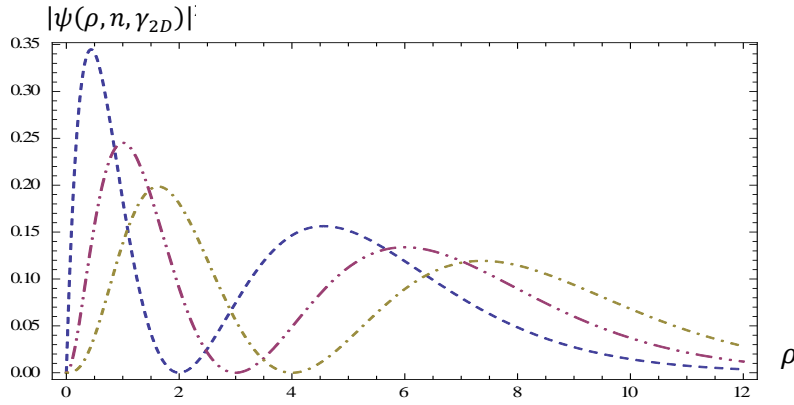
Şekil 4: Dalga Fonksiyonunun Temel Kuantum Sayısının Arttırılmasıyla Değişimi (keyfi ölçek)

Şekil 4'tende anlaşılacağı üzere; her renk farklı bir temel kuantum sayısını, dolayısıyla “farklı bir enerji seviyesine” ait olan dalga fonksiyonuna işaret etmektedir. Burada sabit $\gamma_{1D} = 2$ ve değişen $n=0, 2, 4$ değerleri alınarak çizimler yapılmıştır. Bu sonuca göre, böyle bir potansiyel kuyusunda yer alan bir parçacığın alabileceği enerji değerleri n tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir. Başka bir deyişle kuantize edilmiş enerji değerleri oluşur. Artan n değerlerinin dalga fonksiyonunun piklerinde meydana getirdiği düşüşe dikkat edilmelidir. Bunun yanı sıra n değerlerinin artması dalga maksimum genliğinde de bir azalmaya yol açmaktadır.

İki boyutlu Pseudodot çözümlerinde durum bir boyutlu uygulamaya benzerdir. Çünkü söz konusu değişimlerde baskın olan dalga fonksiyonları çok benzerdirler. Bu sebeple benzer yorumlar iki boyutlu durum için de yapılabilir.



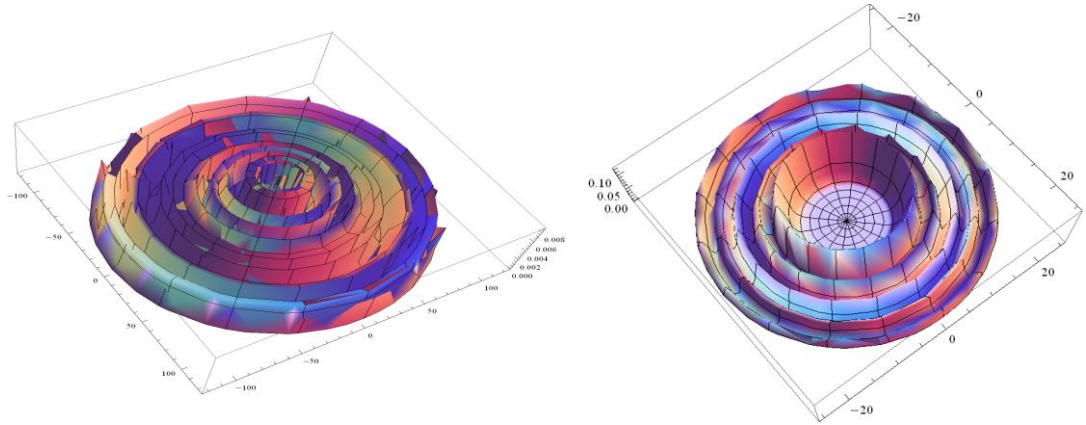
Şekil 5:n= 1, 2, 3 ve Gama=6 Değerleriyle Pseudo harmonik Potansiyelde Bir Parçacığın Dalga Fonksiyonunun Gösterdiği Değişim



Şekil 6: Birinci Uyarılmış Durumda Gama=1, 2, 3 Değerleri Pseudo harmonik Potansiyelde bulunan Parçacığın Bulunma Olasılıklarının Değişimi

Şekil 5 ve şekil 6'da sırasıyla mevcut potansiyelde yer alan parçacığın dalga fonksiyonu ve maksimum bulunma olasılığı, sabit γ_{2D} ve değişik uyarılma sayılarıyla belirlenmeye çalışılmıştır. Şekil 5'te değişen uyarılma sayısı, parçacığa eşlik eden dalga fonksiyonunun hem genliğinde hem de dalga fonksiyonunun dalga boyunda bir azalmaya yol açmıştır. Buda parçacığın bulunma olasılığıyla orantılıdır. Şekil 6' da görüldüğü gibi birinci uyarılmış durumunda gama değerlerinin artması parçacığın maksimum bulunabileceği konumların artışına ve bu noktalarda bulunma olasılıklarında bir azalmaya yol açmıştır.

İki boyutlu Pseudodot yapısında bulunma olasılıkları daha önce radyal kısım ele alınarak araştırılmıştır. Burada ise mevcut potansiyelde bulunan bir parçacık için üç boyutlu bulunma olasılığı incelenmiştir. Bilindiği üzere hem açısal hem de radyal kısımlar bu çizimlerde etkili olmuştur.

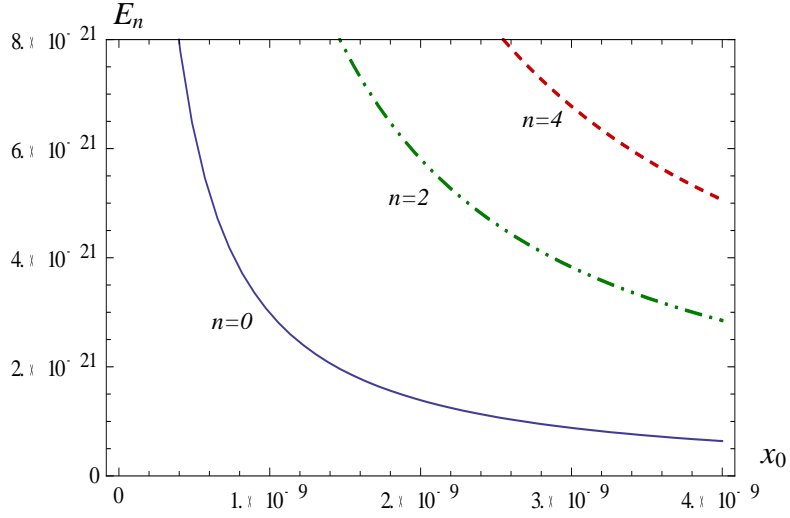


Şekil 7: Artan Uyarılma Sayısıyla(Sol Taraf) ve Artan Gama Sayısıyla(Sağ Taraf) Bulunma Olasılıklarının Potansiyel Ekseni Değişimi

Yukarıda Şekil 7 ile verilen çizimlerde iki boyutta bir parçacığın bulunma olasılıkları üç boyutlu çizimler yapılarak ele alınmıştır. Şekiller incelendiğinde sabit uyarılma yani n değerleriyle birlikte parçacığın mevcut potansiyelde maksimum bulunma olasılığının artan γ_{2D} değerleriyle azaldığı görülmektedir. Yani γ_{2D} sayısının artması, söz konusu potansiyelde bulunan parçacık için; potansiyel kuyusunun derinliğinin azalması ve kuyu genişliğinin artması şeklindedir. Çünkü γ_{2D} değerleri Pseudo harmonik potansiyelde yer alan antidot yani yasaklı bölgenin daha büyük bir alan kaplaması şeklinde karşımıza çıkmaktadır. Buda parçacığın mevcut potansiyelde daha üst yerlerde bulunmasına neden olmaktadır. Böylece kuyu derinliği azalmış fakat parçacık için salınım yapma aralığı genişlemiştir.

Bu tez çalışmasının bu kısmında, Kuantum Pseudodot yapılarında enerjinin deneysel parametreler olan V_0 ve x_0 'a göre değişimi incelenecektir.

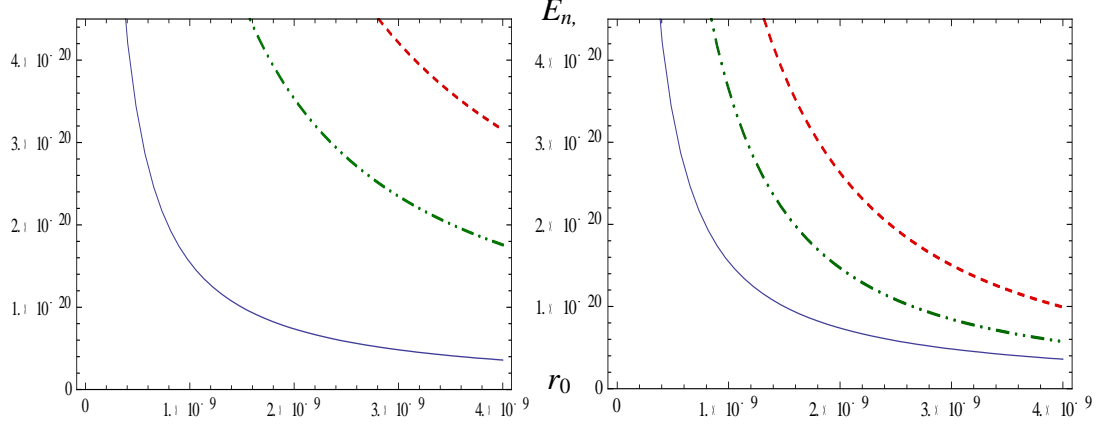
Bir boyutlu kuantum Pseudodot yapısında sabit V_0 değeri için enerjinin, değişen x_0 'a göre değişiminin nümerik olarak analizi için Şekil 8 çizilmiştir.



Şekil 8: Bir Boyutlu Kuantum Pseudodot Yapısında Enerjinin artan x_0 Hapis Boyutuyla Değişimi

Şekil 8'den de anlaşılacağı üzere bir boyutlu Pseudodot yapısında, hapis boyutu yani x_0 değerlerinin artmasıyla enerjide belirgin bir azalma söz konusudur çünkü hapis boyutunun azalması ile enerjinin artması beklenen bir sonuçtur. Burada $V_0=0.125eV$ ve $n=0, 2, 4$ olarak alınmıştır. Bir bağ kurmak gerekirse bir boyutlu kuantum kuyu yapısında da enerji hapis boyutunun karesiyle ters orantılı olarak azalmaktadır. Burada da enerjinin hapis boyutuyla azalması beklenen bir durumdur. İki boyutlu Pseudodot yapısında da aynı şekilde hapis boyutuyla enerjinin azalacağı enerji parametresi kullanılarak görülebilir.

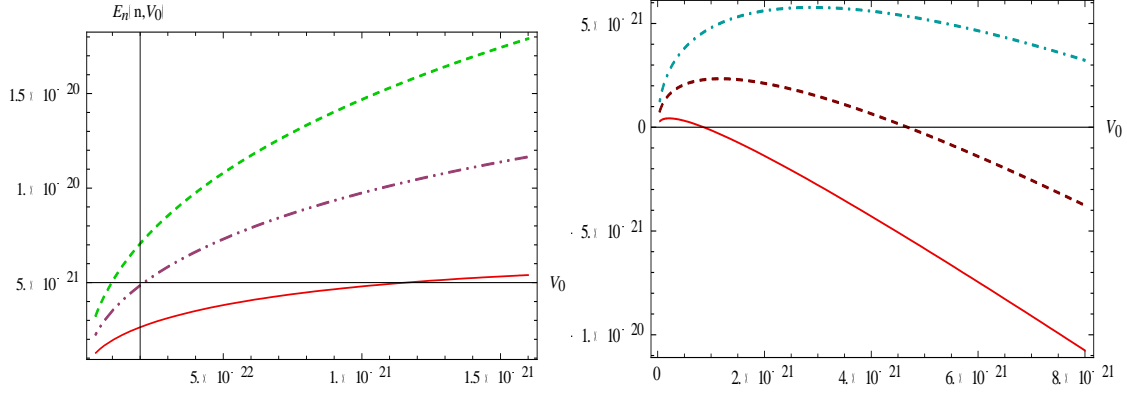
Burada üç boyutlu Pseudodot yapısındaki enerji değişiminin artan uyarılma sayısı, hapis boyutu ve artan yörünge açısai momentum katsayısı, hapis boyutu ile nasıl bir ilişki içerisinde olduğu araştırılmıştır.



Şekil 9: Artan Uyarılma Sayısı, Hapis Boyutu(Solda) ve Artan Yörünge Açısai Momentum Kuantum sayısı, Hapis Boyutu(Sağda) ile Enerji Değerlerinde Meydana Gelen Değişim

Şekil 9’da sabit $n=0$ ve değişen $l=0, 2, 4$ değerleri için (sağda) enerjinin hapis boyutuna göre grafiği çizilmiştir. Yine Şekil 9’da sabit $l=2$ ve değişen $n=0, 2, 4$ değerleri için (solda) enerjinin hapis boyutuna göre grafiği gösterilmiştir. Bu çizimler deneysel parametrelerin $r_0=4\text{nm}$ ve $V_0=0.25\text{eV}$ sabit değerlerinde yapılmıştır. Şekil 9’da yer alan çizimler incelenirse, uyarılmış durumların sayısının artmasıyla enerjide meydana gelen azalma ile (hapis boyutundaki artışın baskın olduğu varsayılarak), yörünge açısai momentum katsayısının artışıyla görülen azalma arasındaki farklılık belirgindir. Bunun temel nedeni 3-D Pseudodot yapısında elde edilen enerji parametresinin sergileyeceği değişimde, uyarılma sayısının yörünge açısai momentum katsayısından daha baskın bir rol oynamasıdır. Şekil 9’un sağ ve sol tarafının analizlerinde, enerji azalışlarında meydana gelen farklılığın nedeni budur. Uyarılma sayısının enerjiye katkısı yörünge açısai momentum katsayısından daha baskın olduğu, enerji özdeğerlerini veren bağıntı incelenerek görülebilir.

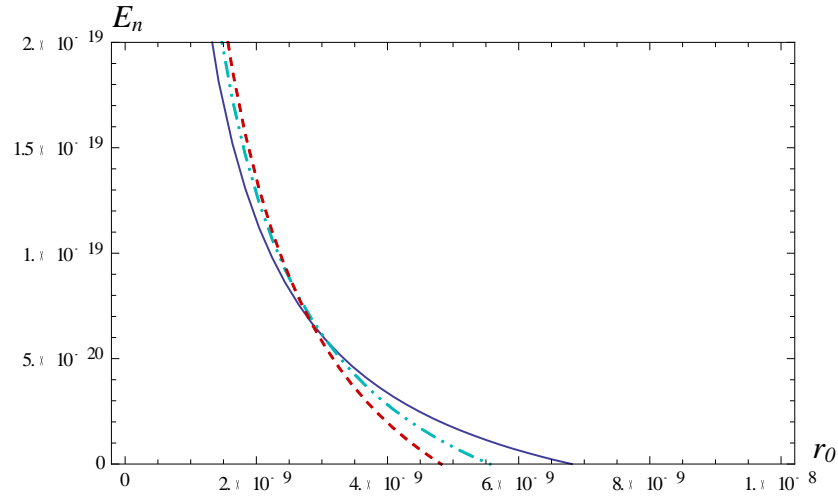
Sabit r_0 değerinde enerjinin deneysel parametre V_0 'a göre değişimi değişik kuantum sayıları altında incelenmiştir.



Şekil 10: Potansiyel Değişim Aralığının Artmasıyla Artan Uyarılma Sayısına Bağlı Olarak Enerji Değişimi (solda) ve Artan Uyarılma Sayısıyla Potansiyel Değişim Aralığının Azalmasıyla Enerjinin Değişimi (Sağda)

Şekil 10'da yer alan, soldaki Enerji - V_0 grafiği çizimleri; $n=2$, $n=4$, $n=6$ uyarılma sayıları, sağda yer alan Enerji - V_0 grafiği ise $n=0$, $n=1$, $n=2$ uyarılma sayıları için $r_0=4\text{nm}$ değerinde çizilmiştir. Solda yer alan uyarılma sayılarının artışıyla enerji değişimi beklendiği gibi artış sergilemektedir. Fakat sağdaki çizimler bunun aksi yöndedir. Bu durum bir boyutlu Pseudodot yapısı için elde edilen enerji özdeğeri ifadesi incelendiğinde kolayca anlaşılabilir. Çizimlerdeki farklılık uyarılma sayılarının değişen potansiyel aralığında baskın olmamasından kaynaklanmaktadır. Solda yer alan grafiklerde uyarılma sayılarının büyüklüğü potansiyel aralığı değişimine rağmen enerjide net bir artışın görülmesi şeklinde gerçekleşirken sağdaki çizimlerde uyarılmış durumlar potansiyel aralığının değişiminde sönük kalmış ve artışta azalış şeklinde bir durum sergilemişlerdir. Aslında her iki durumda da enerjinin artışı açıkça görülmektedir. Bu grafikler potansiyel aralığının yol açabileceği farklılıkları göstermek amacıyla çizilmiştir.

Son olarak, deęişik V_0 deęerleri için, enerjinin r_0 hapis boyutuna göre deęişimi ele alınmıştır.



Şekil 11: Deęişik V_0 Deęerleri için, Enerjinin r_0 Hapis Boyutuna Göre Deęişimi

Şekil 11 de bir boyutlu Pseudodot yapısında, enerjinin artan potansiyel (V_0) deęerleri altında hapis boyutuyla deęişimi incelenmiştir. Burada $V_0=0.15eV$, $V_0=0.225eV$, $V_0=0.3eV$, hapis boyutu $10nm$, uyarılma sayısı $n=6$ deęerleri alınarak çizimler yapılmıştır. Görüldüğü gibi, hapis boyutunun nicelik olarak büyüklüğü enerji üzerinde bir azalma etkisi oluşturmuştur. Bu durum çizimlerin alındığı hapis boyutuyla uyumludur. Burada farklı potansiyel deęerleri kullanılmasına rağmen grafiklerin belli bir noktada kesişmesi dikkat çekicidir. Buda parçacık enerjisinin V_0 deęerlerinin orantılı şekilde artmasıyla her durumda belirli bir deęerde kesişeceği ve aynı karakteri sergileyeceği anlamına gelmektedir. Dikkat edilirse alınan farklı V_0 deęerleri olmasına rağmen belirli bir noktada enerji deęişimlerinin çakıştığı ve tam bu noktada aynı karakteristiği sergiledikleri görülmektedir. Daha sonra yine farklı hapis boyutlarıyla eneriler sıfıra kadar azalma göstermiştir. Burada bir boyutlu Pseudodot yapısındaki deęişimler üzerinde durulmuştur. Böyle bir davranışın iki ve üç boyutlu durumda da görüleceği açıktır.

KAYNAKLAR

- Cetin, A. (2008). A quantum pseudodot system with a two-dimensional pseudoharmonic potential. *Physics Letters A* 372, 3852–3856.
- Chelikowsky, J. R., & Cohen, M. L. (1976). Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors. *Physical Review B* 14, 556–582.
- Hu, J., Wang, L.-w., Li, L.-s., Yang, W., & Alivisatos, A. P. (2002). Semiempirical Pseudopotential Calculation of Electronic States of CdSe Quantum Rods. *The Journal Of Physical Chemistry B* 106, 2447–2452.
- Karaođlu, B. (2008). *Kuantum Mekaniđine Giriř*. Ankara: Seđkin Yayıncılık.
- Kataoka, M., Ford, C. J., Faini, G., Maily, D., Simmons, M., Mace, D. R., et al. (1999). Detection of Coulomb Charging around an Antidot in the Quantum Hall Regime. *Physical Review Letters* 83, 160–163.
- Khordad, R. (2010). Effects of magnetic field and geometrical size on the interband light absorption in a quantum pseudodot system. *Solid State Science* 12, 1253–1256.
- Krashennnikov, A. (2008, Kasım 5). *Helsinki University of Technology*. Retrieved Ocak 5, 2012, from Helsinki University of Technology Department of Applied Physics: <http://tfy.tkk.fi/~asf/physics/lectures/PDF/lect8.pdf>
- Reijniers, J., Peeters, F. M., & Matilus, A. (1999). Quantum states in a magnetic antidot. *Physical Review B* 59, 2817–2823.
- Rezaei, G., Vaseghi, B., Khordad, R., & Azadi Kenary, H. (2011). Optical rectification coefficient of a two-dimensional quantum pseudodot system. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 43, 1853–1856.
- Rezaei, G., Vaseghi, B., Taghizadeh, F., Vahdani, M., & Karimi, M. (2010). Intersubband optical absorption coefficient changes and refractive index changes in a two-dimensional quantum pseudodot system. *Superlattices and Microstructures* 48, 450–457.
- Schuster, R., Ensslin, K., Wharam, D., Kühn, S., & Kotthaus, J. P. (1994). Phase-coherent electrons in a finite antidot lattice. *Phys. Rev. B* 49, 8510–8513.
- Simons, G. (1973). Pseudopotential studies of the water and hydrogen fluoride molecules. *Chemical Physics Letters* 18, 315–318.
- Xie, W. (2012). Electron Raman scattering of a two-dimensional pseudodot system. *Physics Letters A* 376, 1657–1660.