T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOKLU KUANTUM TEL VE NOKTALARININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Abdullah BİLEKKAYA

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİMDALI

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ

EDİRNE -2008

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOKLU KUANTUM TEL VE NOKTALARININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Abdullah BİLEKKAYA

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİMDALI

Bu tez 01/02/2008 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Hasan AKBAŞ	Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ	Prof. Dr. Ş. Erol OKAN
Üye	1. Danışman	2. Danışman

Yrd. Doç. Dr. Mehmet YILMAZ	Yrd. Doç. Dr. Ercan BULUŞ
Üye	Üye

Doktora Tezi
Çoklu Kuantum Tel ve Noktalarının Elektronik Özellikleri
Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada, güncel teknolojik uygulamalarda önemli bir yer tutan kuantum kuyu telleri ve kuantum noktalarının elektronik özellikleri incelenmiştir. Hesaplamalar efektif kütle yaklaşımı içinde sonlu farklar yöntemi ve varyasyonel yöntem kullanılarak yapılmıştır. Temel olarak eşmerkezli kare kesitli GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kuantum kuyu teli, farklı biçimli kuantum telleri ve eşmerkezli küresel GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kuantum noktası çalışılmıştır. Eşmerkezli kare kesitli kuantum kuyu teli içinde hapsedilen bir elektrona düzgün uygulanan elektrik ve manyetik alanın etkileri araştırılmıştır. Bu yapıda bağlanma enerjisi, yabancı atomun konumu, bariyer genişliği ve elektrik alan şiddetinin fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Bağlanma enerjisinin değişimlerinin elektronun gördüğü potansiyel enerjiye, yabancı atomun konumuna, düzgün uygulanan elektrik alan şiddetine bağlı olduğu bulunmuştur. Farklı biçimli kuantum tellerinde yapıların sahip olduğu geometrilerin ve dışarıdan uygulanan elektrik ve manyetik alanın yabancı atom bağlanma enerjisi üzerindeki etkileri incelenmiştir. Ayrıca eşmerkezli küresel kuantum noktasında bağlanma enerjisinin bariyer genişliği ile değişimleri araştırılmıştır.

Yıl: 2008
Sayfa: 58
Anahtar Kelimeler: Kuantum Kuyu Teli, Elektrik Alan, Manyetik Alan, Yabancı Atom Bağlanma Enerjisi.

PhD Thesis
The Electronic Properties of Multiple Quantum Wires and Quantum Dots
Trakya University, Graduate School of Natural and Applied Science
Department of Physics

SUMMARY

In this work, the electronic properties of quantum well wires and quantum dots, which have a great importance in technological applications, are investigated. The calculations are performed using the finite difference numerical method and variational method within the effective mass approximation. Basically, coaxial square cross sectional GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum well wire, quantum wires of different shapes and coaxial spherical GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum dot are studied. The effects of uniform applied electric and magnetic fields on an electron confined in the coaxial square cross sectional quantum well wire are investigated. In this structure, the binding energy is calculated as a funciton of the impurity position, the barrier widht, electric and magnetic field strength. It is found that, the changes in the binding energy occurs depending on the magnitude of the potential enegry walls, the position of the impurity, and the applied uniform electric field strength. The effects of the geometrical shapes of the structures and the applied electric and magnetic fields on the impurity binding energy are investigated for the quantum wires of different shapes. Also, the changes in the binding energy are investigated depending on the barrier widht for the coaxial spherical quantum dot .

Year: 2008
Pages: 58
Keywords: Quantum Well Wire, Electric Field, Magnetic Field, Impurity Binding Energy

TEŞEKKÜR

Tez yöneticiliğimi üstlenerek çalışmalarımda yol gösteren, gerekli olan tüm çalışma ortamını ve imkânlarını sağlayan ve yardımlarını esirgemeyen hocam Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ'a teşekkür etmekten mutluluk duyarım.

Aynı zamanda bu aşamaya kadar desteklerini ve aydınlatıcı bilgilerini esirgemeyen hocalarım Prof. Dr. Ş. Erol Okan'a ve Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Başkanı Prof. Dr. Hasan AKBAŞ'a teşekkürlerimi sunarım. Çalışmalarım boyunca yardımlarını esirmeyen Yrd. Doç. Dr. Figen Boz'a teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bu tez Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Müdürlüğü tarafından TÜBAP-739 nolu projeyle desteklenmiştir. Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Müdürlüğü'ne katkılarından dolayı teşekkür ederiz.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET…… i
SUMMARY……..ii
TEŞEKKÜR……iii
İÇİNDEKİLER……...iv
SİMGELER DİZİNİ……...vi
BÖLÜM 1: GİRİŞ……1

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR İLE İLGİLİ GENEL BİLGİLER……4

2.1. Düşük boyutlu yapılarda hapsedilen bir elektronun özellikleri……..5
2.1.a. $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs kuantum kuyuları……..5
2.1.b $Ga_{1-x}Al_xAs$ / GaAs kuantum telleri……...9
2.2. Düşük boyutlu yapılarda elektrik alan etkisi…….....11
2.3. Düşük boyutlu yapılarda manyetik alan etkisi……..12
2.4. Düşük boyutlu yapılarda yabancı atom problemi…….13

BÖLÜM 3: SAYISAL YÖNTEMLER……15

3.1. Varyasyon Yöntemi…….……....15
3.2. Sonlu Farklar Yöntemi……..16
3.2.a. Kuantum Kuyularına Sonlu Farklar Yönteminin Uygulanması…….....18
3.2.b. Kuantum Tellerine Sonlu Farklar Yönteminin Uygulanması……....20

BÖLÜM 4: SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR…….24

4.1. Kare Kesitli Eşmerkezli Kuantum Tellerinde Yabancı Atoma Elektrik ve Manyetik Alan Etkisi…….24

4.2. Farklı Biçimli Kuantum Tellerinde Elektrik ve Manyetik Alan Altında Yabancı Atom Bağlanma Enerjisi……37

4.4. Eşmerkezli Küresel Kuantum Noktasında Yabancı Atom Problemi……46

KAYNAKLAR…….……...53

ÖZGEÇMİŞ……57

SİMGELER DİZİNİ

m^* : Elektronun etkin kütlesi

a^* : Etkin Bohr yarıçapı

R^* : Etkin Rydberg enerjisi

ε : Dielektrik sabiti

λ : Varyasyonel parametre

γ : Manyetik alanın boyutsuz değeri

ψ : Dalga fonksiyonu

x_i : Yabancı atomun konumu

y_i : Yabancı atomun konumu

η : Hamiltonyendeki elektrik alan terimi

F : Elektrik alan şiddeti

B : Manyetik alan şiddeti

E : Enerji

BÖLÜM 1: GİRİŞ

Düşük boyutlu yapılar farklı tür yarıiletkenlerin bir araya getirilmesiyle oluşturulmaktadır. Kristal büyütme teknolojisinde sağlanan gelişmeler ile yarıiletkenler çok hassas bir biçimde bir atomik tabaka üzerine başka bir atomik tabaka yerleştirilerek büyütülebilmektedir. Başlıca deneysel yöntemler arasında Sıvı Faz Büyütme (LPE), Moleküler Demet Büyütme (MBE) ve Kimyasal Buhar Depolama (CVD) yöntemleri sayılabilir. Bu yöntemler ile boyutları 10^{-6} cm' den daha küçük düşük boyutlu yapıların üretimi gerçekleştirilmiştir. Bu gelişmeler sonucu yeni elektronik devre elemanlarının yapımı son derece ilginç fizik problemlerini de doğurmuştur. Düşük boyutlu yapıların elektronik ve optik özellikleri halen yaygın olarak araştırılmaktadır.

Günümüzde düşük boyutlu yarıiletken yapıların araştırılması kuantum fiziği ile açıklanabilen davranışlara sahip yeni elektronik devre elemanlarının üretilmesini mümkün kıldığından büyük ilgi çekmektedir. Düşük boyutlu yarıiletken sistemlerden oluşan nanometre boyutunda elektronik ve optoelektronik cihazlar günümüz bilgisayar ve haberleşme endüstrisinde kullanılan devrelerin temel yapıtaşlarını oluşturmaktadır. Bu cihazların fiziğinin ve çalışma prensiplerinin bilinmesi, bu sistemlerin daha ayrıntılı olarak incelenmesi ile mümkündür.

Son yıllarda düşük boyutlu yapı olarak tanımlanan kuantum kuyusu, kuantum kuyu teli ve kuantum noktaları üzerinde birçok araştırma yapılmıştır (Akbaş vd. 1995; Okan vd. 2004; Manaselyan vd. 2002).

Düşük boyutlu yapıların akım iletiminde en önemli etken olan elektron veya deşik yoğunluğu yapıya yabancı atom katılmasıyla kontrollü bir biçimde artırılabilir. Bu katkının yapıya kazandırdığı özellikler gerek uygulamadaki önemi gerekse içerdiği zengin fizik nedeniyle son derece ilgi gören bir araştırma konusu olmuştur.

Düşük boyutlu yapılara dışarıdan bir elektrik alan uygulandığında elektron dağılımında polarizasyon olur ve kuantum enerji durumları değişir. (Chao vd. 1995; Montes vd. 1998; Duque vd. 2001). Bu etkiler düşük boyutlu yapının kullanıldığı aygıtın çıkış yoğunluğunun kontrol edilmesinde ve ayarlanmasında kullanılabilir. Ayrıca kuantum enerji durumlarının değişimi ile yabancı atom bağlanma enerjisi de değiştiği için elektrik alan etkisinin incelemesi önemlidir. Yapılan çalışmalarda etkin kütle yaklaşımında varyasyonel bir yöntem kullanılarak silindirik ve dikdörtgen biçimli kuantum tellerinde dışarıdan uygulanan bir elektrik alanın yabancı atom bağlanma enerjileri üzerindeki etkileri araştırılmıştır. (Aktaş ve Boz, 2004; Ulas

vd. 1997; Akbaş vd., 1998). Bu çalışmalarda bağlanma enerjisinin telin geometrik biçimine, yabancı atom konumuna ve uygulanan elektrik alan şiddetine bağlı olarak artma veya azalma gösterdiği gözlenmiştir.

Manyetik alan etkileri düşük boyutlu yapılar için önemlidir. Dışarıdan uygulanan manyetik alan, elektronların durum yoğunluğunun değiştirilmesine olanak sağlar (Boz ve Aktaş, 2005; Zounoubi vd. 2001; Branis vd. 1993). Daha önceki çalışmalarda manyetik alan etkisi altındaki silindirik, parabolik ve dikdörtgen biçimli GaAs kuantum tellerinde yabancı atom bağlanma enerjileri hesaplanmıştır. (Boz ve Aktas, 2005; Duque vd. 2001; An vd. 2006; Niculescu vd. 2001). Bu çalışmalarda tel eksenine paralel uygulanan manyetik alanın elektronu yapının merkezinde tutmaya çalıştığı gözlenmiştir.

Son zamanlarda farklı geometrik yapılarda yabancı atom bağlanma enerjisi elektrik ve manyetik alan etkisi altında hesaplanmıştır. (Aktas vd., 2005; Kasapoğlu vd., 2003, Erdoğan vd., 2006). Bu çalışmalarda bağlanma enerjisinin dışarıdan uygulanan elektrik ve manyetik alan şiddetine bağlı olduğu kadar yapının geometrik biçimine de kuvvetlice bağlı olduğu görülmüştür. Bu tezde kare, parabol ve üçgen kesitli kuantum tellerini, kare kesitli eşmerkezli kuantum telini ve eşmerkezli küresel kuantum noktasını inceledik.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde kuantum kuyusu ve kuantum teli içinde hapsedilen bir elektronun taban durum enerjileri ve dalga fonksiyonları bulunmuştur. Bu yapılara yabancı atom katılmasıyla bağlanma enerjisi hesaplamaları genel olarak verilmiştir. Ayrıca bu bölümde elektrik ve manyetik alan etkisinin sistemin Hamiltonyen'ine getirdiği katkılar da verilmiştir.

Düşük boyutlu yapılarda elektronun enerji durumlarının incelenmesi Schrödinger denkleminin çözümü ile mümkün olmaktadır. Bu yapılarda analitik çözümlerin bulunması yabancı atom varlığında veya elektrik ya da manyetik alan uygulandığında zorlaştığı için nümerik yöntemler kullanılmaktadır. Bu nümerik yöntemler sonlu farklar yöntemi ve varyasyon yöntemidir.

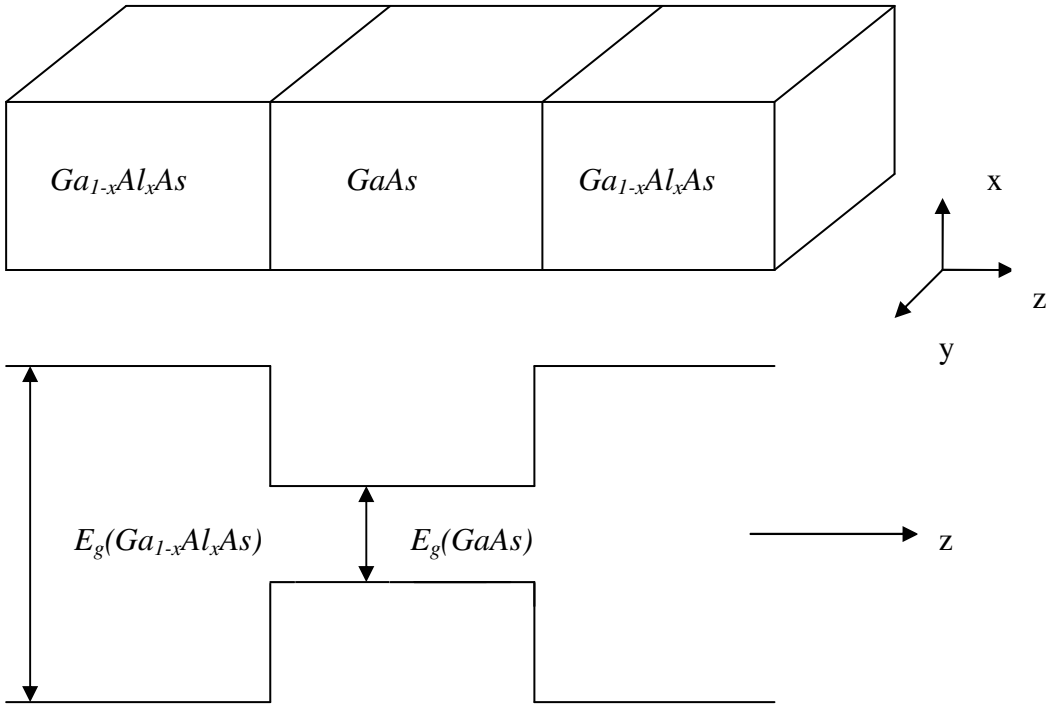
Biz bu tezde sonlu farklar yöntemini kullandık. Diğer çalışmalardan farklı olarak bu yöntemle elektrik ve manyetik alan etkisindeki kuantum tellerinde hapsedilen bir elektronun bütün enerji durumlarını ve dalga fonksiyonlarını hiçbir varyasyonel yöntem kullanmadan nümerik olarak hesapladık. Sonlu farklar yöntemi her biçimdeki kuantum teline ve noktasına uygulanabilir. Yapıya yabancı atom katıldığında varyasyonel yöntem kullanarak bağlanma enerjilerini hesapladık. Sonlu farklar yöntemi ve varyasyon yönteminin uygulanışı üçüncü bölümde verilmiştir.

Son bölümde ise tartışma ve sonuçlar verilmiştir. Tartışma ve sonuçlar bölümünde eşmerkezli kare kesitli kuantum tellerinde bağlanma enerjisini yabancı atomun konumuna, bariyer genişliğine ve elektrik alan şiddetine bağlı olarak inceledik. Daha sonra elektrik ve manyetik alan altında kare-üçgen ve üçgen-üçgen kombinasyonlu kuantum tellerinde bağlanma enerjisine baktık. Son olarak da eşmerkezli küresel kuantum noktasının bariyer genişliğine bağlı olarak bağlanma enerjisini hesapladık.

Bu tezdeki nümerik hesaplamalarda, Fortran 77'de kendi yazdığımız programlar kullanılmıştır.

BÖLÜM 2: DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR İLE İLGİLİ GENEL BİLGİLER

Genel anlamıyla düşük boyutlu yapılar kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak sınıflandırılırlar. Burada boyut yük taşıyıcın (elektron veya deşik) serbest olarak hareket edebileceği yön sayısını belirtir. Kuantum kuyuları aynı türden iki yarıiletken tabakanın arasına farklı tür yarıiletken tabakanın eklenmesiyle oluşturulur. Kuantum kuyularına örnek olarak $Ga_{1-x}Al_xAs / GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ yapısı verilebilir. Burada x alüminyum konsantrasyonudur. Kuantum kuyularında yük taşıyıcıları iki boyutta serbest parçacık gibi hareket edebilirken, farklı tabakaya doğru (kristalin büyütme yönünde) hareketleri bir boyutta sınırlanır ve enerjileri kuantize olur. Taşıyıcıların hareketinin iki boyutta kuantize olduğu yapılar kuantum telleri olarak adlandırılır. Kuantum tellerine örnek olarak $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş kare, üçgen veya silindir kesitli bir GaAs teli verilebilir. Kuantum noktalarında ise taşıyıcının hareketi üç boyutta da kuantize olur. $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş küp veya küresel biçimli GaAs kuantum noktaları oluşturulabilir.



Şekil 2.1: Simetrik $Ga_{1-x}Al_xAs$ /GaAs/ $Ga_{1-x}Al_xAs$ kuantum kuyusunun oluşturulması.

Yukarıdaki şekilde gösterildiği gibi bir kuantum kuyusu $Ga_{1-x}Al_xAs$ yarı iletkenleri arasına $GaAs$ yarı iletkeninin yerleştirilmesiyle oluşturulur. Burada x malzemedeki alüminyum miktarını göstermektedir.

2.1. Düşük Boyutlu Yapılarda Hapsedilen Bir Elektronun Özellikleri

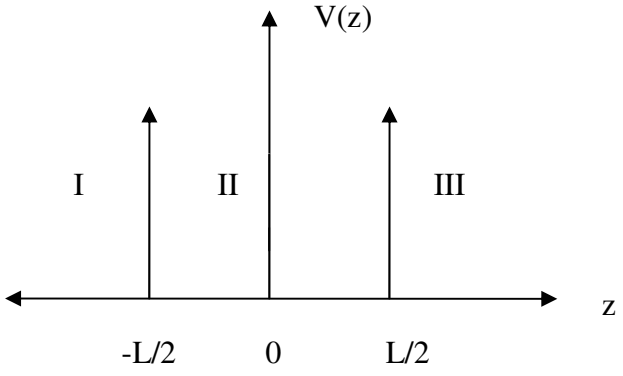
Düşük boyutlu yapılarda hapsedilen bir elektronun özelliklerini incelerken zamandan bağımsız Schrödinger denklemini çözerek elektronun enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını elde ederiz Bu bölümde düşük boyutlu yapılardan kuantum kuyuları ve kuantum telleri incelenecektir.

2.1.a. $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ kuantum kuyuları:

Elektronun hapsedildiği potansiyel duvarının yüksekliğine göre sonlu ve sonsuz kuantum kuyusu oluşturulabilir. Buradaki potansiyel yüksekliği x konsantrasyonu ile kontrol edilebilmektedir. İlk önce sonsuz kuantum kuyusu incelenecektir. Sonsuz kuantum kuyusunda potansiyel fonksiyonu

$$V(z)=\begin{cases}0 & -L/2 \le z \le L/2 \\ \infty & \text{diger yerlerde}\end{cases} \tag{2.1}$$

olarak verilir. Şekil 2.2'deki sonsuz kuantum kuyusu için $V(z)=\infty$ olan yerlerde elektron bulunamayacağı için dalga fonksiyonu sıfıra eşit olmak zorundadır. Bu nedenle sadece II. bölgede çözüm vardır.



Şekil 2.2: Sonsuz kuantum kuyusu

II. bölgede $V(z)=0$ için Schrödinger denklemini yazarsak

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2\psi_n(z)}{\partial z^2}=E_n\psi_n(z) \tag{2.2}$$

buluruz. Bu denklemin çözümü

$$\psi_n(z)=A\sin(k_n z)+B\cos(k_n z) \tag{2.3}$$

dir. Burada

$$k_n=\sqrt{\frac{2m^*E_n}{\hbar^2}} \tag{2.4}$$

olarak verilir. $z=-L/2$ ve $z=L/2$ de sınır şartlarını uygularsak,

$$\begin{aligned} A\sin(\frac{k_n L}{2})&=0\\ B\cos(\frac{k_n L}{2})&=0 \end{aligned} \tag{2.5}$$

buluruz. Buna göre iki mümkün çözüm vardır.

$$\begin{aligned} \psi_n(z)&=B\cos(k_n z) \qquad n=1,3,5,.....\\ \psi_n(z)&=A\sin(k_n z) \qquad n=2,4,6,..... \end{aligned} \tag{2.6}$$

burada $k_n=\frac{n\pi}{L}$ dir. A ve B katsayıları normalizasyon sabitleridir. Bu sabitler dalga fonksiyonunun normalize edilmesiyle bulunur.

$$\int_{-L/2}^{L/2}\psi_n^{\,*}(z)\psi_n(z)dz=1 \tag{2.7}$$

Enerji özdeğerleri ise,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} n^2 \tag{2.8}$$

olarak bulunur. Bu sonuca göre, potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji özdeğerleri bir n tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir (Karaoğlu, 1994).

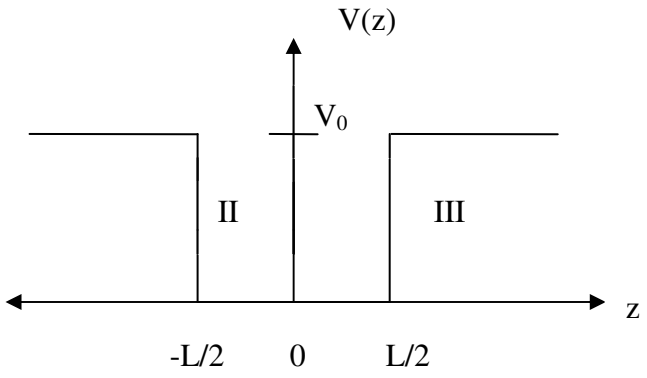
Şekil 2.3'teki sonlu kuantum kuyusunu ele aldığımızda, potansiyel fonksiyonu

$$V(z) = \begin{cases} 0 & -L/2 \le z \le L/2 \\ V_0 & \text{diger yerlerde} \end{cases} \tag{2.9}$$

olarak tanımlanır. Bu durum için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \tag{2.10}$$

denklemi ile verilir.



Şekil 2.3: Sonlu kuantum kuyusu.

(2.10) denklemini düzenlersek

$$\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2} - (V(z) - E)\frac{2m^*}{\hbar^2}\psi(z) = 0 \qquad (2.11)$$

buluruz. Bu denklemin çözümleri;

I. bölge için,

$$\psi_I(z) = A\exp(\alpha z) \qquad (2.12)$$

bulunur. Burada $\alpha = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ dır.

II. bölge için dalga fonksiyonu,

$$\psi_2(z) = C\cos(k_z z) + D\sin(k_Z z) \qquad (2.13)$$

olur. Burada $k_Z = \frac{2m^*E}{\hbar^2}$ olarak verilir.

III. bölge için çözüm,

$$\psi_{III}(z) = B\exp(-\alpha z) \qquad (2.14)$$

olur. α yukarıda tanımlandığı gibidir. Sınır şartları uygulandığında çift ve tek çözümler bulunur. Buna göre çift çözümler,

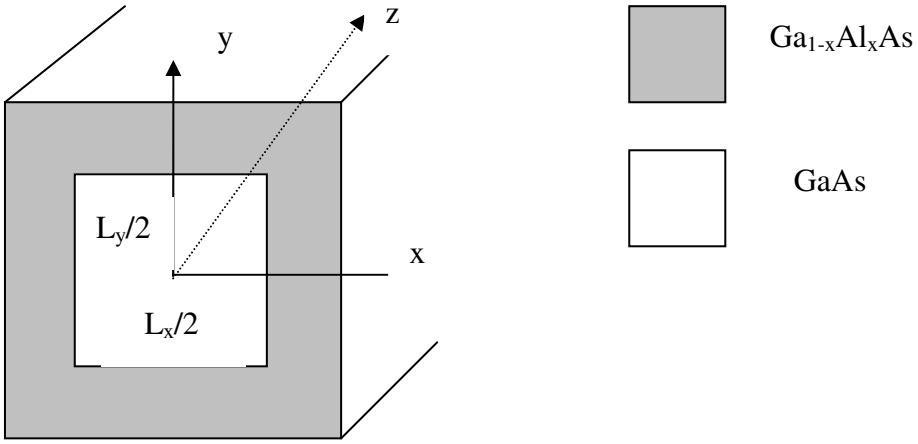
$$\psi_{çift}(z) = \begin{cases} C\exp(\alpha L/2)\cos(k_z L/2)\exp(\alpha z) & -\infty\langle z\langle -L/2 \\ C\cos(k_z L/2) & -L/2 \le z \le L/2 \\ C\exp(\alpha L/2)\cos(k_z L/2)\exp(-\alpha z) & L/2\langle z\langle\infty \end{cases} \qquad (2.15)$$

ve tek çözümler de

$$\psi_{tek}(z)=\begin{cases} -D\exp(\alpha L/2)\sin(k_z L/2)\exp(\alpha z) & -\infty\langle z\langle -L/2 \\ D\sin(k_z L/2) & -L/2\le z\le L/2 \\ D\exp(\alpha L/2)\sin(k_z L/2)\exp(-\alpha z) & L/2\langle z\langle\infty \end{cases} \qquad (2.16)$$

şeklindedir. C ve D normalizasyon katsayılarıdır (Karaoğlu, 1994).

2.1.b. $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ kuantum telleri:



Şekil 2.4: Kare kesitli kuantum teli.

Kuantum tellerinde elektronun hareketi iki yönde sınırlandırılır. Yukarıdaki şekilde verilen kuantum telinde elektron *x* ve *y* yönlerinde potansiyel engelleri ile hapsedilmiştir. Sonsuz kuantum teli için potansiyel

$$V(x,y)=\begin{cases} 0 & |x|\le L_x/2 \quad ve \quad |y|\le L_y/2 \\ \infty & |x|\rangle L_x/2 \quad ve \quad |y|\rangle L_y/2 \end{cases} \qquad (2.17)$$

şeklindedir. Sonsuz kuantum teli içindeki bir elektron için Schrödinger denklemini yazarsak,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d}{dx^2}+\frac{d}{dy^2}+\frac{d}{dz^2}\right)+V(x,y)\right]\psi_0(x,y,z)=E_0\psi_0(x,y,z) \qquad (2.18)$$

z yönünde sınırlama olmadığı için elektron bu yönde serbest parçacık gibi davranır ve diğer yönlerde kuantize olur. Bu yüzden dalga fonksiyonu;

$$\psi_0(x,y,z) = \psi_0(x,y)\psi_0(z) \tag{2.19}$$

şeklinde alınarak Schrödinger denkleminin çözümü

$$\psi_0(x,y,z) = A\cos(\frac{\pi}{L_x}x)\cos(\frac{\pi}{L_y}y)\exp(ik_z z) \tag{2.20}$$

olur. Elektronun taban durum enerjisi de

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left[(\frac{\pi}{L_x})^2 + (\frac{\pi}{L_y})^2\right] + \frac{\hbar^2 {k_z}^2}{2m^*} \tag{2.21}$$

olarak bulunur.

Sonlu kuantum telini ele alırsak potansiyel

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & |x| \le L_x/2 \quad ve \quad |y| \le L_y/2 \\ V_0 & |x\rangle L_x/2 \quad ve \quad |y\rangle L_y/2 \end{cases} \tag{2.22}$$

biçimindedir ve sonlu kuantum kuyusu için Schrödinger denklemini

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\frac{d}{dx^2}+\frac{d}{dy^2}+\frac{d}{dz^2})\psi(x,y,z) + V(x,y)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \tag{2.23}$$

olarak yazabiliriz. Bu denklemin analitik olarak çözülebilir. Ancak bazı değişik potansiyel profilleri için analitik çözüm çok zor veya imkânsız olabilmektedir. Böyle durumlarda Runge-Kutta veya sonlu farklar yöntemi gibi nümerik yöntemler kullanılmaktadır.

2.2. Düşük Boyutlu Yapılarda Elektrik Alan Etkisi

Elektrik alan etkisiyle yarıiletken devre elemanlarının fiziksel özelliklerinde meydana gelen değişimler deneysel ve teorik olarak yoğun bir biçimde araştırılmaktadır. (Akbaş, 1998; Okan vd. 2000; Akankan vd., 2006).Yarıiletken bir kristale büyütme yönünde bir elektrik alan uygulanmasıyla yük taşıyıcıları dağılımında polarizasyon oluşur ve enerji durumlarında kaymalara neden olur.

Düşük boyutlu sistemlere elektrik alan uyguladığı zaman sistemin Hamiltonyeni'ne bir elektrik alan terimi eklenir. Bu terim

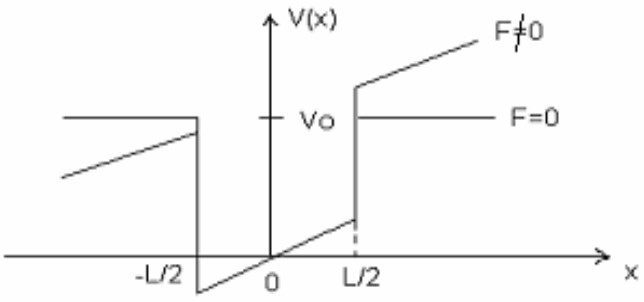
$$H^F = |e|Fx \tag{2.24}$$

olarak verilir. Burada e elektronun elektrik yükünü ve F ise x yönünde uygulanan düzgün bir dış elektrik alan şiddetini göstermektedir. Örneğin, bir kuantum kuyusuna x yönünde bir elektrik alan uygulanması ile kuyunun alacağı şekil 2. 5' de gösterilmiştir.

Nümerik hesaplarda çok büyük ve çok küçük sayılardan kaçınmak için elektriksel potansiyel enerji,

$$eFx = \eta x \tag{2.25}$$

olarak alınır.



Şekil 2.5: x yönünde uygulanan elektrik alan etkisi altındaki kuantum kuyusu

(2.25) denkleminde,

$$\eta = \frac{|e|a^* F}{R^*} = \frac{a^* F\ 0.01}{R^*} = \frac{F}{5{,}83} \tag{2.26}$$

dir. Buradaki elektrik alan büyüklüğü F, kV/cm birimindedir. Ayrıca uzunluk birimi olarak etkin Bohr yarıçapı $a^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m^* e^2}$ ve enerji birimi olarak etkin Rydberg enerjisi $R^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}}$ olarak verilir. Burada ε ve m*, sırasıyla kristalin dielektrik sabiti ve elektronun etkin kütlesidir. GaAs kristali için $\varepsilon = 12.5$ ve $m^* = 0.067 m_0$ (m_0 serbest elektron kütlesi) kullanılarak $a^* \cong 100 A^0$ ve $R^* = 5.83 meV$ olarak hesaplanır.

2.3. Düşük Boyutlu Yapılarda Manyetik Alan etkisi

Bir kristale manyetik alan uygulanması elektronik seviyelerin boyutluluğunu değiştirir ve durum yoğunluklarında yeni bir dağılıma yol açar (Niculescu vd.,1998; Masale vd. 1992). Dış manyetik alan etkisi iletim durumunda bulunan iki boyutlu bir yapının hassas bir şekilde karakterize edilmesi için yöntemler geliştirilmesine olanak sağlar. Magnetofotoiletkenlik ve siklotronrezonans deneyleri buna örnek verilebilir (Aktaş, 1998). Ayrıca manyetik alanın katıhal fiziğindeki önemli bir uygulaması da Hall iletkenliğinin kuantizasyonudur (Kittel, 1996).

Düşük boyutlu yapılara düzgün bir manyetik alan ($\vec{B} = \vec{\nabla} x \vec{A}$) uygulandığında genel Hamiltonyen,

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{P} + \frac{|e|}{c}\vec{A}\right]^2 + V(x, y) \tag{2.27}$$

olarak verilir. Bu Hamiltonyende $\vec{A}$ manyetik alanın vektör potansiyeli ve $\vec{P}$ momentum olarak tanımlanır. Bir kuantum teli içinde bulunan bir elektrona z ekseni boyunca bir manyetik alan uygulandığında, R^* etkin Rydberg ve a^* etkin Bohr yarıçapı uzunluk birimleri kullanılırsa sistemin Hamiltonyeni,

$$H = -\nabla^2 + \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2) + \gamma L_z + V(x, y) \tag{2.28}$$

olur. Burada $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2R^*}$, $\omega_c = \frac{eB}{m^* c}$'dir. Taban durumu için L_z açısal momentumun özdeğeri sıfır olur.

2.3. Düşük Boyutlu Yapılarda Yabancı Atom Problemi

Düşük boyutlu yapılarda yarı iletken malzemelere yabancı atom katılmasıyla taşıyıcı sayısı ve dolayısıyla da iletkenlik arttırılabilir. Yabancı atom katkısının yapıya kazandırdığı özellikler gerek uygulamalardaki önemi gerekse içerdiği zengin fizik nedeniyle çok çalışılmaktadır (Aktaş 1998; Boz 2004) . Yabancı atomların elektronik ve optik özelliklerinin anlaşılması düşük boyutlu yapılar kullanılarak üretilen cihazların optik ve iletim özelliklerini anlamak için çok önemlidir (Erdoğan vd., 2005; Niculescu vd., 2001).

Düşük boyutlu yapılara yabancı atom katıldığında sistemin Hamiltonyeni'ne ek bir terim gelir. Bu terim elektron ve yabancı atom arasındaki Coulomb etkileşme terimidir. Rydberg birim sisteminde sonlu kuantum teli içinde bir yabancı atom katıldığında sistemin Hamiltonyen'i

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{r}_i|} + V(x, y) \tag{2.29}$$

ile ifade edilir. Burada $|\vec{r} - \vec{r}_i| = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}$ elektron ve yabancı atom arasındaki mesafedir. (2.29) denklemi a^* ve R* birimlerinde

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} + V(x, y) \tag{2.30}$$

olarak yazılır. Yabancı atoma bağlı elektronun enerji öz değerlerini ve dalga fonksiyonlarını bulmak için varyasyonel yönteme başvurulur. Buna göre yabancı atom için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi_i(x,y,z) = N\psi_0(x,y,z)\exp(-\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2+z^2/\lambda}) \tag{2.31}$$

olarak seçilebilir. Buradaki λ varyasyonel parametre, $\psi_0(x,y,z)$ yabancı atom yokken sonlu farklar yöntemi ile bulunan taban durum dalga fonksiyonudur. Yabancı atom bağlanma enerjisi E_B, yabancı atom yokken sistemin taban durum enerjisi ile yabancı atom varken sistemin taban durum enerjisi arasındaki fark olarak tanımlanır. Buna göre

$$E_B = E_O - \left[\frac{\langle\psi_i(x,y,z)|H|\psi_i(x,y,z)\rangle}{\langle\psi_i(x,y,z)|\psi_i(x,y,z)\rangle}\right]_{\lambda_{\min}} \tag{2.32}$$

olarak yazılabilir.

BÖLÜM 3: SAYISAL YÖNTEMLER

Kuantum mekaniğinde karşımıza çıkan problemlerin çoğunda, sistemin Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek çok zor veya imkânsızdır. Bu durumda sayısal yöntemlere başvurulur. Bu bölümde çalışmalarımızda kullandığımız sonlu farklar yöntemini ile varyasyon yöntemini inceledik. Sonlu farklar yöntemiyle dışarıdan uygulanan elektrik ve manyetik alanın etkisi altındaki sistem için varyasyona gerek kalmadan nümerik çözüm yapılabilmektedir. Ayrıca sonlu farklar yönteminin her türlü geometrik biçimdeki kuantum tellerine uygulanabilme avantajı vardır (Moghraby vd., 2002). Sonuç olarak bu yöntemle bir fiziksel problemi temsil eden iki boyutlu diferansiyel denklemler hızlı bir şekilde nümerik olarak çözülebilmektedir.

3.1. Varyasyon Yöntemi

Varyasyon yöntemi başlangıçta tahmin ettiğimiz dalga fonksiyonunu geliştirmeyi ve taban durum enerjisi minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Bu yaklaşık yöntem sistemin en düşük enerji durumuna karşı gelen öz fonksiyonun biçimi hakkında tahminde bulunabildiğimiz özdeğer problemlerine uygulanabilir.

Bir H Hamiltonyenin özdeğerleri E_n ve özvektörleri U_n olsun. Taban durumu için

$$HU_0 = E_0 U_0 \tag{3.1}$$

dır. Varyasyon işlemini uygulayacağımız sistemin herhangi bir ψ durumunda Hamiltonyenin beklenen değeri için aşağıdaki eşitlik yazılabilir.

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \tag{3.2}$$

ψ fonksiyonu normlanmışsa payda bire eşit olur. Yukarıdaki eşitlik ancak $\psi = U_0$ durumunda mümkündür. Her ψ durumu $\{U_i\}$ özvektörlerinin süperpozisyonu olarak yazılabileceği için

$$\psi = \sum_i^{\infty} c_i U_i \qquad \sum_c |c_i|^2 = 1 \quad \text{(Normlanmış } \psi \text{ durumu)}$$

$$E = (\psi, H\psi) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j (U_i, HU_j) \tag{3.3}$$

$$= \sum_i \sum_j c_i^* c_j E_j (U_i, U_j) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j E_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i c_i^* c_i E_i = \sum_i |c_i|^2 E_i$$

olur. Her zaman taban durumu diğer durumlardan küçük enerjili olduğu için $(E_i \geq E_0)$ için, serinin her teriminde E_i yerine E_0 alırsak eşitliğin sağ tarafı küçülür.

$$E \geq \sum_i |c_i|^2 E_0 = E_0 \sum_i |c_i|^2 \tag{3.4}$$
$$E \geq E_0$$

bu eşitliğe göre E değeri ne kadar aşağı çekilebilirse, taban durumuna o kadar yaklaşılmış olunur. Seçilen ψ deneme dalga fonksiyonu bir λ parametresine bağlı ise, E değeri bu λ parametresine göre nimimize edilerek taban durumuna iyice yaklaşılır. Bu değişken $\langle H \rangle$'nin mümkün en küçük değerini alıncaya kadar değiştirilir.

$$\psi = \psi(\vec{r}, \lambda)$$
$$E(\lambda) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{3.5}$$
$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0$$

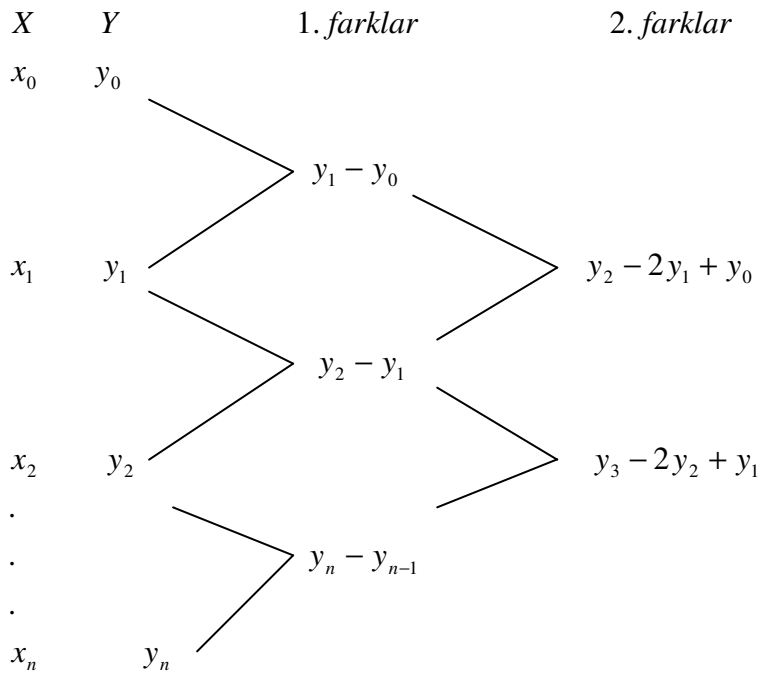
Bu yöntem daha genel olarak $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, ..., \lambda_n)$ gibi birden çok parametreyle uygulanabilir. (Karaoğlu, 1994; Köksal, 1992).

3.2. Sonlu farklar yöntemi

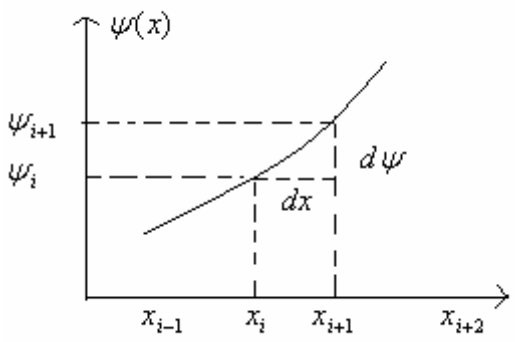
Sayısal yöntemlerin hemen hepsi ele alınan fonksiyonun en azından yerel olarak analitik olduğu ve bir polinom ile temsil edildiği kabulüne dayanır. Sonlu farklar yöntemi

genellikle interpolasyon, integral ve türev alma gibi işlemlerde fonksiyonu bir polinom ile temsil edilir. Sonlu farklar yönteminin avantajı Sonlu farklar yöntemi farklar tablosu kullanımını gerektiren bir yöntemdir (Karaoğlu vd., 1996).

Fonksiyonun eşit aralıklarla oluşturulduğunu varsayalım ve bağımsız değişkende düzgün ve eşit arlıklarla ölçülürse;



Şekil 3.1: Farklar tablosu



Şekil 3.2: Sonlu farklar yönteminde dalga fonksiyonunun gösterimi

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{\Delta\psi}{\Delta x} = \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{x_{i+1} - x_i} + ... \tag{3.6}$$

Yukarıda görüldüğü gibi ileri farkları belli bir noktada sonlandırdık. Sonlu farklar yöntemi deyimi buradan gelir. Yukarıdaki ifadeyi başka bir noktayı alarak yazarsak;

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{\Delta\psi}{\Delta x} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \tag{3.7}$$

ikinci dereceden yazarsak

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{\Delta}{\Delta x}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{dx^2} \end{aligned} \tag{3.8}$$

buluruz.

3.2.a. Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Kuyularına Uygulanması:

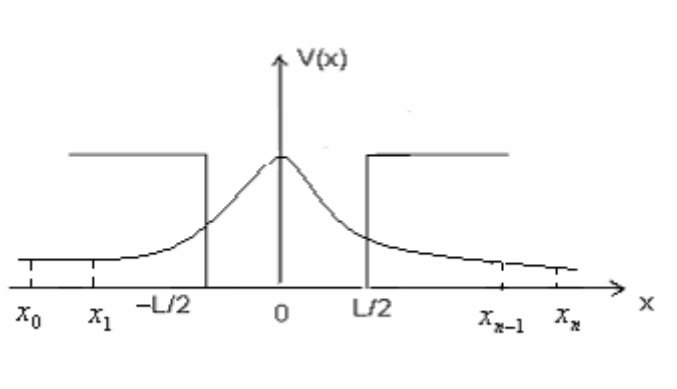
Kuantum kuyu çözümleri için Schrödinger denklemini çözmemiz gerekir. Buna göre,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\psi(x) = 0 \tag{3.9}$$

denklemini a^* ve R* birimlerini kullanarak tekrar yazarsak

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\psi(x) = 0 \tag{3.10}$$

elde ederiz. Kuantum kuyusunu çözmek için ilk önce kuyuyu *dx* eşit aralıklarıyla i=1,2, …..,*n* eşit parçaya bölelim.



Şekil 3.3: Sonlu farklar yönteminin sonlu kuantum kuyusuna uygulanışı

i. nokta için yukarıda elde ettiğimiz 2. türev ifadesini Schrödinger denkleminde yerine koyarak

$$-\frac{\psi_{i-1}-2\psi_i+\psi_{i+1}}{dx^2}+[V(x_i)-E]\psi_i=0 \tag{3.11}$$

elde ederiz. i=1 için (3.11) denklemini tekrar yazarsak;

$$-\frac{\psi_0-2\psi_1+\psi_2}{dx^2}+[V(x_1)-E]\psi_1=0 \tag{3.12}$$

(3.11) denklemini düzenlersek,

$$-\frac{1}{dx^2}\left[(-2-V(x_1)dx^2)\psi_1+\psi_2\right]=E\psi_1 \tag{3.13}$$

buluruz. i=2 için;

$$-\frac{1}{dx^2}\left[(\psi_1-(2+V(x_2)dx^2)\psi_2+\psi_3\right]=E\psi_2 \tag{3.14}$$

i=3 için;

$$-\frac{1}{dx^2}\left[(\psi_2-(2+V(x_3)dx^2)\psi_3+\psi_4\right]=E\psi_3 \tag{3.15}$$

Benzer şekilde *n* nokta için *n* tane denklem yazılır. Bu denklemleri de aşağıdaki gibi matris şeklinde yazabiliriz.

$$-\frac{1}{dx^2}\begin{bmatrix} -2-v(x_1)dx^2 & 1 & 0 & 0 & . & . & . & . \\ 1 & -2-v(x_2)dx^2 & 1 & 0 & . & . & . & . \\ 0 & 1 & -2-v(x_3)dx^2 & 1 & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ . \\ . \\ \psi_n \end{bmatrix} = E\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ . \\ . \\ \psi_n \end{bmatrix} \qquad (3.16)$$

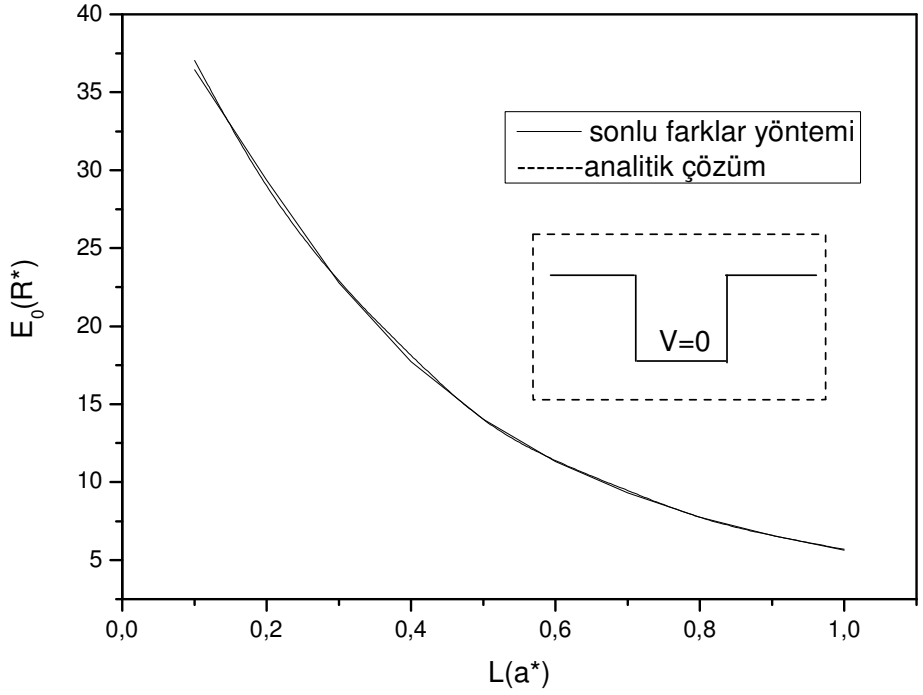
Bu matrisi çözümü bize E_n enerji öz durumlarını ve ψ_n dalga vektörlerini verir. Şekil 3.4'de sonlu ve sonsuz kuantum kuyuları için analitik çözüm ve sonlu farklar yöntemi ile bulunan sonuçlar gösterilmiştir. Sonlu farklar yöntemi ile analitik çözümler ile uyum içerisindedir.

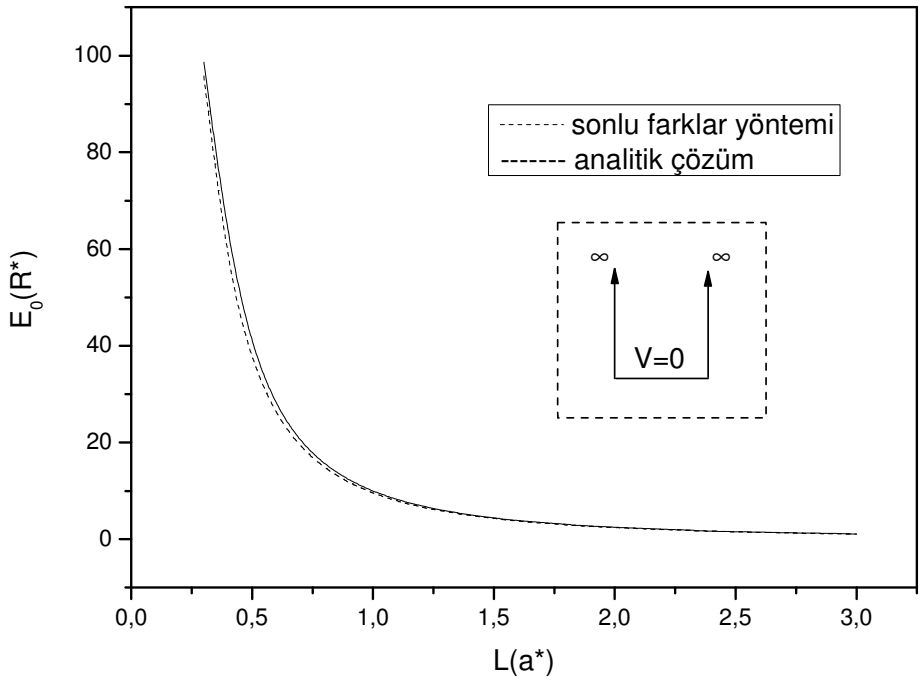
3.2.b. Sonlu Farklar Yönteminin Kuantum Tellerine Uygulanması:

Kuantum teli içinde hapsedilen bir elektronun enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını bulmak için Shrödinger denklemini çözmemiz gerekir. Elektrik ve manyetik alan etkisi altında, Rydberg birim sisteminde kuantum teli için Shrödinger denklemini şöyle yazabiliriz;

$$H\psi = E\psi$$
$$\left[-\frac{d}{dx^2}^2 - \frac{d^2}{dy^2} + V(x,y) + \eta x + \frac{1}{4}\gamma^2(x^2+y^2)\right]\psi(x,y) = (E_x + E_y)\psi(x,y) \qquad (3.17)$$

Burada *F: kV/cm* cinsinden elektrik alan şiddeti ve *B: Tesla* cinsinden manyetik alan şiddeti olmak üzere $\eta = \frac{F}{5{,}83}$, $\gamma = 1.576 * B$ 'dir.

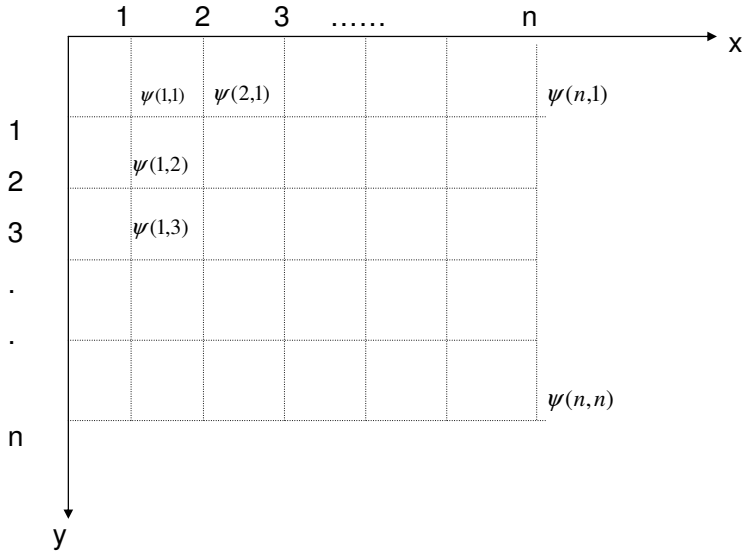




Şekil 3.4.A: Sonlu kare kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliği ile değişimi.

B: Sonsuz kare kuyu için taban durum enerjisinin kuyu genişliği ile değişimi.

Kuantum teli çözümü için sonlu farklar yöntemini kullanmak üzere şöyle bir yol izleyebiliriz. Teldeki bir elektronun hareketi iki boyutta sınırlandığından; *x* ve *y* eksenlerinde eşit adımlarla dalga fonksiyonlarını yazalım (Tsetseri vd., 2002; Moghraby vd., 2002).



Şekil 3.5: Kuantum telinde dalga fonksiyonlarının farklar tablosu üzerinde gösterimi

Sonlu farklar yöntemindeki ikinci türev tanımını kullanarak $\psi(1,1)$ için Shröninger denklemi yazılırsa ;

$$\frac{1}{dx^2}(\psi(1,0)-2\psi(1,1)+\psi(1,2))-\frac{1}{dy^2}(\psi(0,1)-2\psi(1,1)+\psi(2,1))+ V(1,1)\psi(1,1)=(E_{x1}+E_{y1})\psi(1,1) \tag{3.18}$$

bulunur. Benzer şekilde $\psi(1,1),\psi(1,2),.....,\psi(n,n)$ için (3.18) denklemi tekrar yazılırsa

$$\begin{pmatrix}
\frac{4}{dx^2}+V(1,1) & -\frac{1}{dx^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{dy^2} & 0 & \cdots \\
-\frac{1}{dx^2} & \frac{4}{dx^2}+V(1,2) & -\frac{1}{dx^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{dy^2} & \cdots \\
0 & -\frac{1}{dx^2} & \frac{4}{dx^2}+V(1,3) & -\frac{1}{dx^2} & 0 & \cdots & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & -\frac{1}{dy^2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{dx^2} & \frac{4}{dx^2}+V(n,n)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \psi(1,1) \\ \psi(1,2) \\ \psi(1,3) \\ \vdots \\ \psi(n,n) \end{pmatrix}
= E
\begin{pmatrix} \psi(1,1) \\ \psi(1,2) \\ \psi(1,3) \\ \vdots \\ \psi(n,n) \end{pmatrix}$$

(3.19)

matrisi elde edilir. Bu matrisi çözen bir programla *E* enerji özdeğerlerini ve $\psi(x, y)$ dalga fonksiyonlarını bulabiliriz. Bunun için fortran altında çalışan ve hazır library kullanarak matrisleri çözen bir program kullandık. Analitik çözümün çok zor veya imkansız olduğu durumlarda hazırladığımız matrisi bu programa çözdürerek hem enerji özdeğerlerini hem de dalga fonksiyonlarını hızlı bir şekilde bulmuş olduk.

BÖLÜM 4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde, bölüm 3'te anlatılan analitik ve sayısal yöntemler kullanılarak, kare kesitli eşmerkezli kuantum telinde bağlanma enerjisinin yabancı atom konumuna, bariyer genişliğine ve elektrik alan şiddetine bağlı olarak değişimine bakıldı. Daha sonra dışarıdan uygulanan elektrik ve manyetik alan altında farklı biçimli kuantum tellerinde yabancı atom bağlanma enerjisi hesaplandı. Son olarak da eşmerkezli küresel kuantum noktasında bariyer genişliğine bağlı olarak bağlanma enerjisi hesaplanmış ve ilgili yorumlar yapılmıştır. Hesaplamalar etkin kütle yaklaşımı içinde sonlu farklar yöntemi ve varyasyon yöntemi kullanılarak yapılmıştır.

4.1. Kare Kesitli Eşmerkezli Kuantum Telinde Yabancı Atoma Elektrik ve Manyetik Alanın Etkisi

Daha önce yapılan çalışmalarda dış elektrik ve manyetik alan altında koaksiyel silindirik kesitli kuantum tellerinde yabancı atom bağlanma enerjisi hesaplanmıştır (Aktaş vd., 2005; Mikhailov vd., 2000)

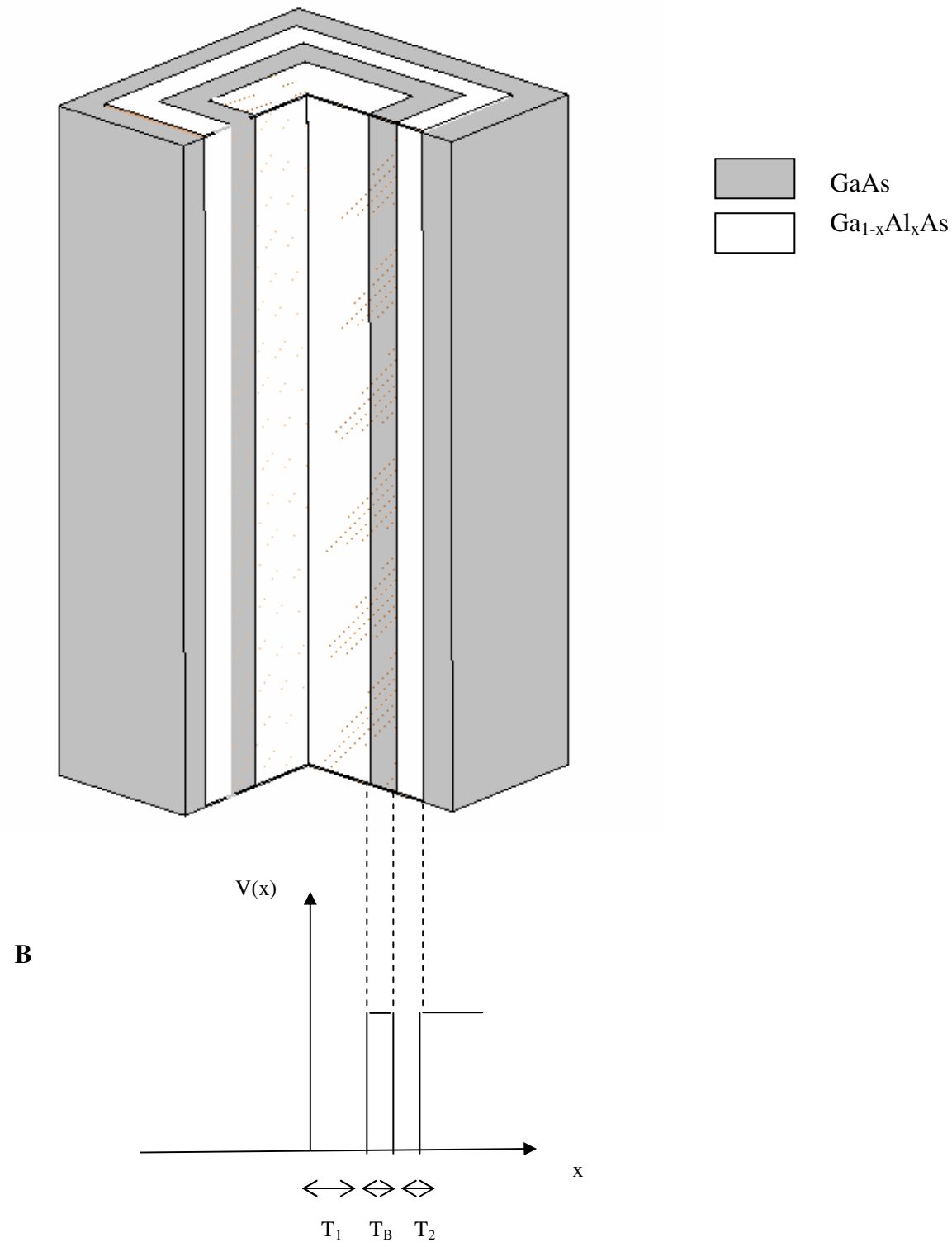
Bu bölümde yabancı atom konumuna, elektrik alan şiddetine ve bariyer genişliğine bağlı olarak kare kesitli eşmerkezli kuantum telinde yabancı atomun taban durum bağlanma enerjileri hesaplanmıştır. Kare kesitli eşmerkezli kuantum teli sisteminin geometrik yapısı şematik olarak şekil 4.1.A'da gösterilmiştir. Şekil 4.1.B'de, x eksenine göre potansiyel profil kesiti vardır.

Etkin kütle yaklaşımı içinde z ekseni boyunca uzanan kare kesitli eşmerkezli kuantum teline tel eksenine dik olarak x yönünde elektrik alan uygulanması durumunda sistemin Hamiltonyeni,

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{P} + \frac{e\vec{A}}{c}\right]^2 + |e|Fx + V(x,y) \tag{4.1}$$

olarak yazılabilir. Burada m^* elektronun etkin kütlesi, F elektrik alan şiddetidir. $\vec{P}$ momentum operatörü, $\vec{A}$ manyetik alanın vektör potansiyelidir ve $\vec{A} = (-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0)$, $\vec{B} = (0,0,B)$ olarak seçilmiştir. m^* elektronun etkin kütlesidir.

A



Şekil 4.1.A: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinin şematik gösterimi.

B: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinin *x* eksenine göre potansiyel profil kesiti

Denklem (4.1) de $V(x,y)$ sonlu bariyer potansiyelidir ve

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & 0\le x\le x_1 \;\;;\;\; 0\le y\le y_1\\ V_O & x_1\le x\le x_2 \;\;;\;\; y_1\le y\le y_2\\ 0 & x_2\le x\le x_3 \;\;;\;\; y_2\le y\le y_3\\ V_O & x_3\le x\langle\infty \;\;;\;\; y_3\le y\langle\infty\end{cases} \tag{4.2}$$

olarak verilir. Burada V_O=228meV alınmıştır.

Sistemin Hamiltonyen'i uzunluk birimi olarak $a^*=\hbar^2\varepsilon/m^*e^2$ etkin Bohr yarıçapı ve enerji birimi olarak $R^*=m^*e^4/2\hbar^2\varepsilon^2$ etkin Rydberg birim sisteminde

$$H=-\nabla^2+\eta x+\gamma L_z+\frac{\gamma^2}{4}(x^2+y^2)+V(x,y), \tag{4.3}$$

olarak verilir. Burada $\eta=|e|a^*F(kV/cm)/R^*$ (F elektrik alan şiddeti) ve $\gamma=e\hbar B/2m^*cR^*$ (B manyetik alan şiddeti) dir. L_Z açısal momentum operatörünün z bileşenidir ve taban durumu için sıfırdır. Burada elektronun hareketi x ve y yönlerinde sınırlı z yönünde ise serbesttir. Taban durum enerjisi E_1 ve taban durum dalga fonksiyonu $\psi(x,y,z)$ nin x ve y bileşenleri $\psi_1(x,y)$ sonlu farklar nümerik yöntemi ile bulunur. Bu yöntem bölüm 3.2'de açıklanmıştı. O halde yabancı atom yokken sistemin taban durum enerjisi

$$H_1\psi_1(x,y)=E_1\psi_1(x,y), \tag{4.4}$$

denkleminden bulunur. Burada H_1

$$H_1=-\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\eta x+\frac{\gamma^2}{4}(x^2+y^2)+V(x,y). \tag{4.5}$$

şeklindedir.

$(x_i, y_i, 0)$ noktasında bulunan bir yabancı atom için sistemin Hamiltonyen'i

$$H_2 = H_1 - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} \tag{4.6}$$

olarak alınır. Burada $\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}$ yabancı atom ile elektron arasındaki mesafe, ε elektronun hareket ettiği ortamın dielektrik sabitidir ve sistemin her yerinde ε=12.5 alınmıştır.

Yabancı atomun taban durumu için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi_2(x, y, z) = N_2\psi_1(x, y)\exp(-\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda) \tag{4.7}$$

olarak seçilir. Burada N_2 normalizasyon sabiti ve λ varyasyonel parametredir. Bu parametre H_2 hamiltonyeni kullanılarak bulunan E_2 in minimize edilmesiyle bulunur.

$$E_2 = \left\langle \psi_2(x, y, z) \middle| H_2 \middle| \psi_2(x, y, z) \right\rangle_{\lambda_{\min}} \tag{4.8}$$

a^* ve R^* birimlerinde yabancı atom bağlanma enerjisi E_B, yabancı atom yokken elektronun taban durum enerjisinden E_0'dan yabancı atom varken ki E_1 enerjisinin arasındaki fark olarak tanımlanır.

$$\begin{aligned} E_B &= E_1 - E_2 \\ &= -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{2I_1}{I_2} \end{aligned} \tag{4.9}$$

burada

$$A = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\,\psi_1^{\,2}(x, y)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(-2\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda)}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}\,/\,\lambda}dz \tag{4.10}$$

ve

$$B = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1{}^2(x,y)\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2+z^2}/\lambda)dz \tag{4.11}$$

olarak verilir. (4.10) ve (4.11) denklemleri üç katlı integral olduğundan bunları elle çözmek zordur ve bilgisayarda bu integrallerin hesabı çok zaman alır. Bu nedenle Bessel fonksiyonlarını kullanarak (4.10) ve (4.11) denklemlerini iki katlı integral olarak yazabiliriz.

1. derece modifiye Bessel fonksiyonlarının $K_\upsilon(xt)$ integral gösteriminin tanımı aşağıdaki gibidir. (Gradshteyn ve Ryzhik, 1980).

$$K_\upsilon(xt) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\upsilon+\frac{1}{2})}(\frac{x}{2t})^\upsilon\int_0^\infty \frac{\exp(-x\sqrt{t^2+z^2})}{\sqrt{t^2+z^2}}z^{2\upsilon}dz\,. \tag{4.12}$$

Bu tanımı kullanarak yukarıdaki integraller

$$\begin{aligned} A^t &= 2K_0(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}/\lambda) \\ B^t &= 2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}K_1(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}/\lambda), \end{aligned} \tag{4.13}$$

olur. Burada K_0 ve K_1 sırasıyla birinci derece modifiye Bessel fonksiyonlarıdır. Buna göre A ve B yeniden yazılırsa

$$A = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1{}^2(x,y)K_0(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2/\lambda)} \tag{4.14}$$

ve

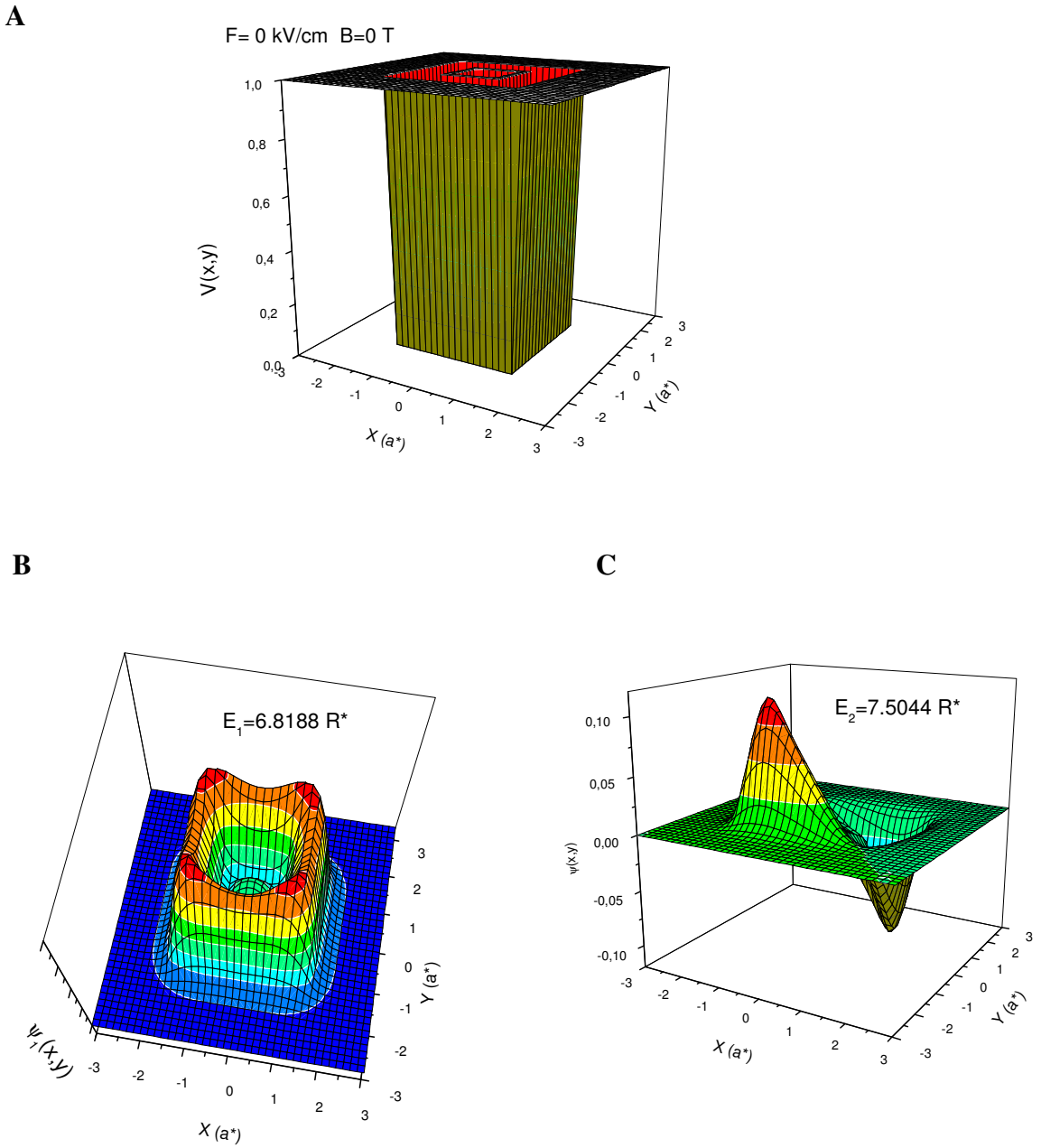
$$B = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_1{}^2(x,y)\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}K_1(2\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2/\lambda)} \tag{4.15}$$

biçimini alır.

Kare kesitli eşmerkezli GaAs kuantum telinde yabancı atom bağlanma enerjisi, yabancı atom konumunun, elektrik alan şiddetinin ve bariyer genişliği T_B' nin fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. İlk önce sistemde yabancı atom yokken elektrik ve manyetik alan etkileri incelenmiştir. Hesaplamalar etkin kütle yaklaşımı içinde sonlu farklar ve varyasyonel yöntem kullanılarak yapılmıştır. Sistemin her yerinde $\varepsilon = 12.5$ alınmış ve sonuçlar a^* ve R^* birimleri cinsinden verilmiştir ($a^* \cong 98$ Å ve R^*=5.83 *meV)*. Yaklaşık olarak V_O=228meV potansiyelini karşılayan Al konsatrasyonu x=0.3 olarak seçilmiştir.

İlk olarak Şekil 4.2.A'da kare kesitli eşmerkezli kuantum telinin elektrik ve manyetik alansız potansiyel profili gösterilmiştir. Bu şekillerde T_B=0.2a^* alınmıştır. Şekil 4.2B'de taban durum enerjisi ve dalga fonksiyonunu, Şekil 4.2.C'de ise 1. uyarılmış durum enerjisi ve dalga fonksiyonu gösterilmiştir.

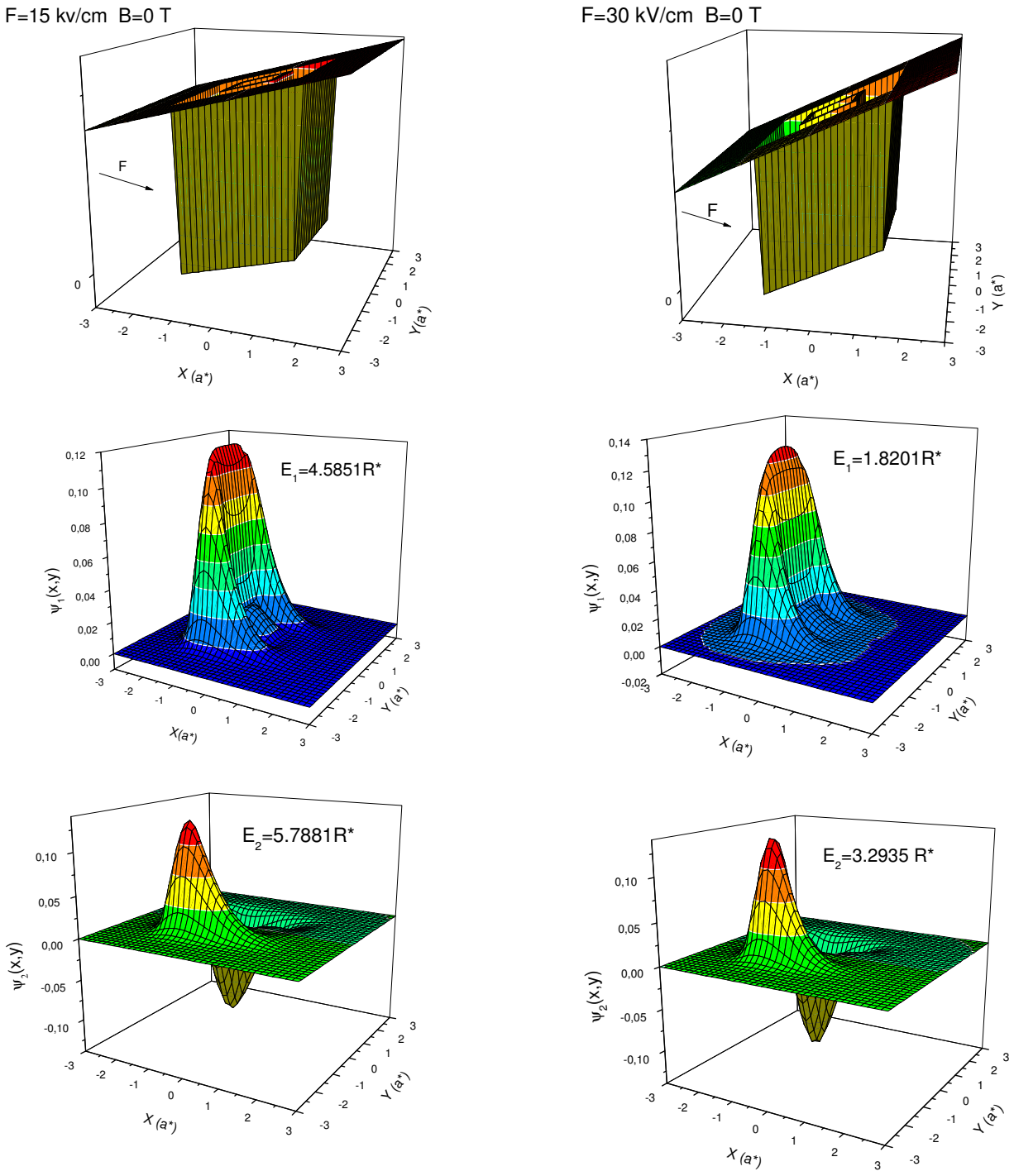
Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinde elektrik alan etkisi şekil 4.3'de gösterilmiştir. Elektrik alan x yönünde uygulanmış ve şiddeti F=15kV/cm ve F=30kV/cm olarak alınmıştır. Uygulanan elektrik alan eşmerkezli kuantum telinin simetrisi bozmakta ve enerji değerleri azalmaktadır. Şekil 4.4'de x yönünde elektrik alanla birlikte z yönünde manyetik alan da uygulanmaktadır. Burada elektrik alan ile manyetik alan arasında bir çekişme olmaktadır. F=15kV/cm elektrik alan altında B=0.63T manyetik ala uygulandığında enerji değerleri artmış ve taban durum dalga fonksiyonunun bir kısmı iç tele doğru kaymıştır. Manyetik alan 1.9T yapıldığında ise elektrik alanın etkisi tamamen azalıp manyetik alan daha etkin olmuştur. Taban durumda elektron tamamen iç tele geçmiştir. Manyetik alan elektronu iç telde daha çok lokalize etmiştir.



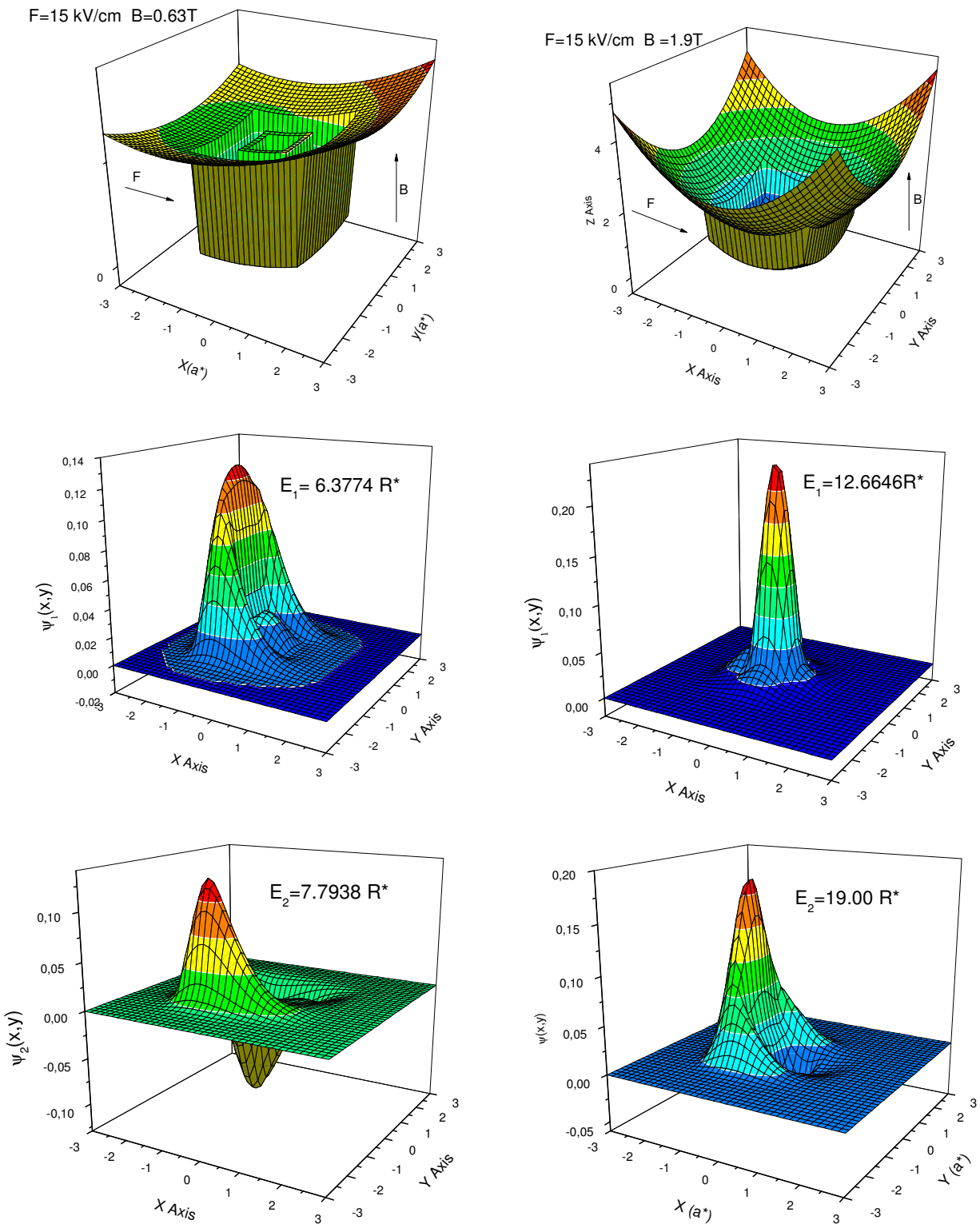
Şekil 4.2.A: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinin potansiyel profili

B: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinin taban durum enerjisi ve dalga fonksiyonu

C: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinin 1. uyarılmış durum enerjisi ve dalga fonksiyonu



Şekil 4.3: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinde *x* yönünde uygulanan F=15kV/cm ve F=30kV/cm elektrik alan şiddetleri için, potansiyel profilleri ile taban durum ve birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonları.

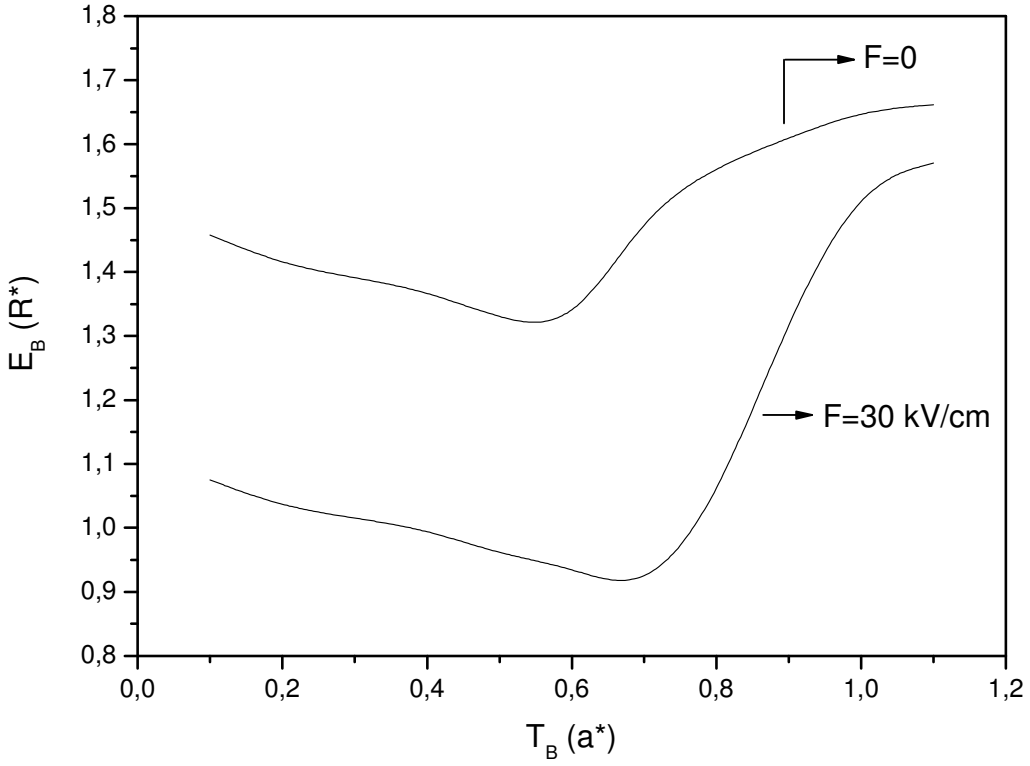


Şekil 4.4: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinde *x* yönünde F=15kV/cm elektrik alan şiddeti ve *z* yönünde B=0.63T ve B=0.9T manyetik alan şiddetleri için potansiyel profilleri ile taban durum ve birinci uyarılmış durum dalga fonksiyonları.

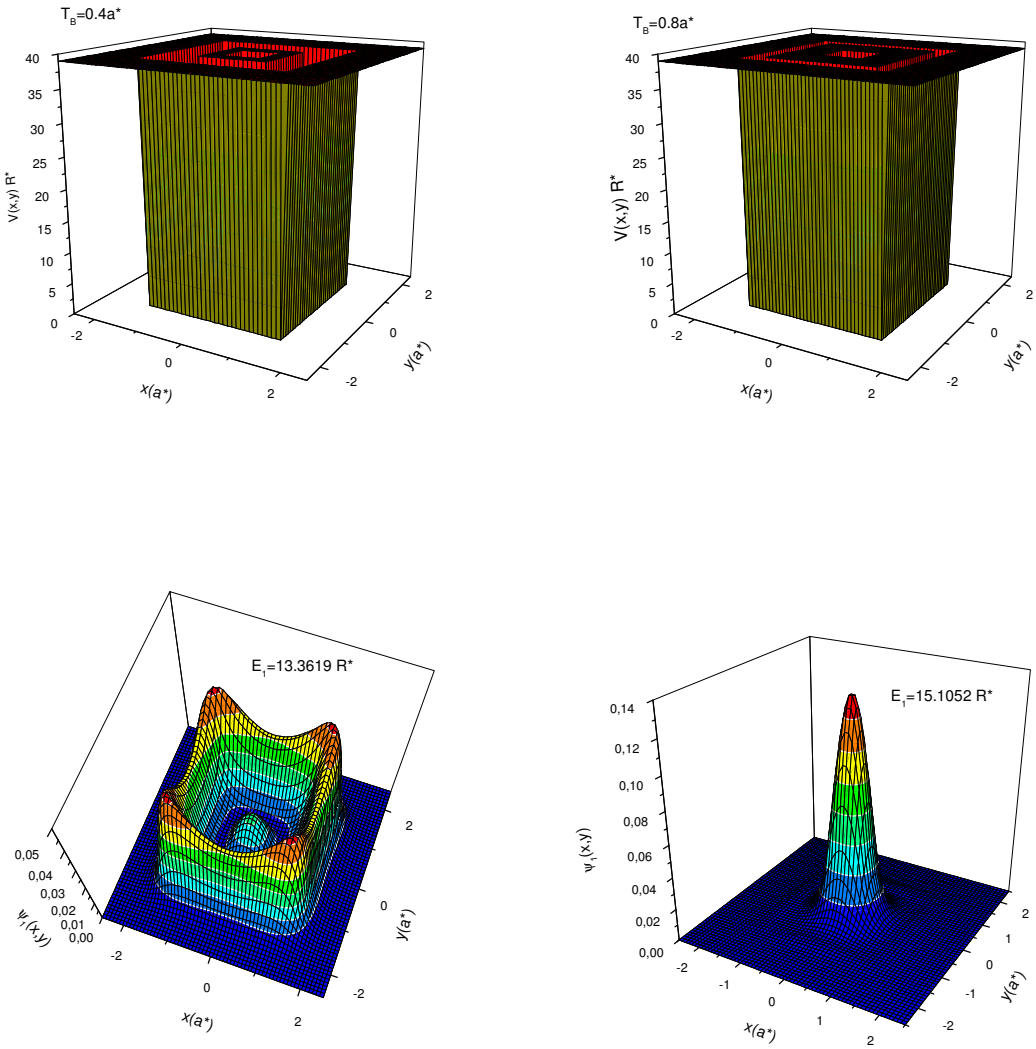
Şekil 4.5 ve şekil 4.7'de sırasıyla kuantum telinin merkezinde ve sağ dış telin kenarında bulunan yabancı atom için elektrik alanlı ve alansız bağlanma enerjileri T_B bariyer genişliğinin fonksiyonu olarak gösterilmiştir. Her iki şekilde de $T_1 = 0.4a^*$ sabit ve T_B 0.1'den başlayarak artarken T_2, 1a* dan 0'a doğru azalmaktadır.

Şekil 4.5'de ilk önce bariyer genişliği ince ve T_2, T_1den daha büyük olduğu için elektron çoğunlukla dıştaki kuantum telinde yerleşmiştir. Bu durum şekil 4.6'da T_B=*0.4a** için gösterilmiştir. *F=0* için, T_B artarken elektron ve yabancı atom arasındaki zayıf Coulomb etkileşmesinden dolayı bağlanma enerjisinde çok az bir azalma görülür. $T_B (\cong 0.6a^*)$ kritik değerinde, elektron artık dıştaki kuantum telinde tutunamaz ve içteki tele geçer. Bu da bağlanma enerjisinde artışa sebep olur. Elektronun iç telde bulunduğu şekil 4.6'da T_B=$0.8a^*$ değeri için görülmektedir. Dışarıdan bir elektrik alan, $F = 30\,\mathrm{kVcm^{-1}}$ uygulandığında, bağlanma enerjisi elektrik alansız duruma kıyasla Coulomb etkileşmesinden dolayı azalma gösterir. Elektrik alan elektronu dıştaki kuantum telinde tutmaya çalıştığı için, kritik bariyer genişliği daha büyük bir değere gider. Kritik bariyer genişliği aşıldıktan sonra elektron iç kuantum telinde yer amaya başlar ve bağlanma enerjisi artar. Buradaki artış elektrik alansız artıştan daha keskindir.

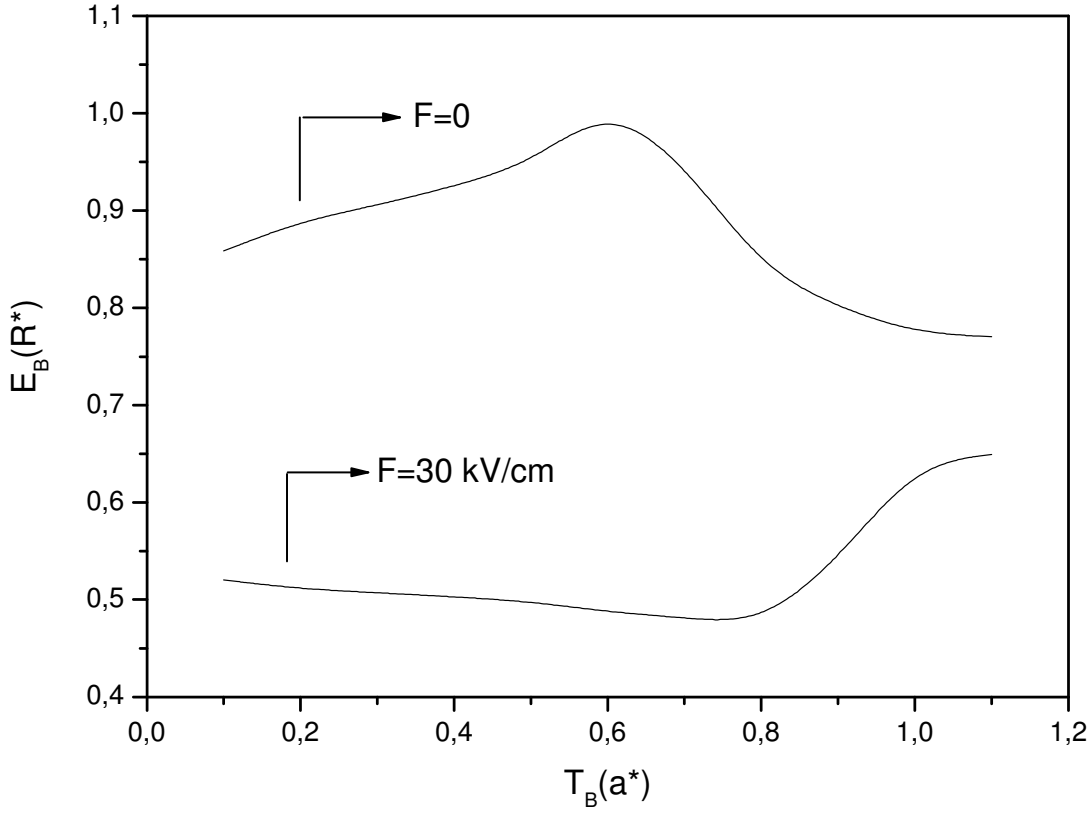
Şekil 4.7'de yabancı atom dıştaki telin sağ kenarında bulunmaktadır. Elektrik alan yokken, yukarıdaki durumdan farklı olarak, bağlanma enerjisi, $T_B \approx 0.7a^*$ kritik değerine kadar artan bariyer genişliği ile neredeyse doğrusal olarak artmaktadır. Bu durum, dıştaki kuantum telinde bulunan elektronun dalga fonksiyonunun bulunma olasılığının T_2 azalırken daha güçlü olma eğilimi göstermesinden kaynaklanmaktadır. Kritik değerden daha büyük bariyer genişliği için, elektron içteki kuantum teline tünelleme yapar ve sabit bir değere varmadan önce bağlanma enerjisinde bir azalma gözlenir. Çünkü dıştaki tel o kadar incedir ki, bağlanma enerjisi üzerindeki etkisi kaybolur. Bundan dolayı bağlanma enerjisi bariyerde yabancı bir atomlu tek bir kuantum telinin sınırına uyan bir enerji değerine geçer. x yönünde $F = 30\ \mathrm{kVcm^{-1}}$ elektrik alan uygulandığında T_B'ye göre bağlanma enerjisinin davranışı, yabancı atomun merkezde olduğu durumdaki davranışına benzer. Çünkü elektrik alan dalga fonksiyonunu dıştaki kuantum telinin sol kısmında ve yabancı atomdan uzak yerleşmeye zorlamaktadır. Elektrik alandan dolayı kritik bariyer genişliği daha büyük değerlere kayar. Kritik bariyer genişliği aşıldığında bağlanma enerjilerinde tek bir kuantum telinin sahip olduğu bağlanma enerjisine doğru yaklaşmak için bir eğilim gösterir.



Şekil 4.5: F=0 ve F=30kV/cm için yabancı atom bağlanma enerjisinin bariyer genişliği ile değişimi.



Şekil 4.6: Kare kesitli eşmerkezli kuantum telinde farklı bariyer genişlikleri için potansiyel profilleri ve taban durum dalga fonksiyonları.



Şekil 4.7: F=0 ve F=30kV/cm için dış tel kenarında bulunan yabancı atom bağlanma enerjisinin bariyer genişliği ile değişimi.

4.2. Farklı biçimli kuantum tellerinde elektrik ve manyetik alan altında yabancı atom bağlanma enerjisi

x ve *y* yönlerinde farklı potansiyel engelleri alınarak farklı biçimli kuantum telleri elde edilmiştir. Buna göre şekil 4.8A'da *x*-ekseninde kare kuyu, *y*-ekseninde üçgen kuyu potansiyeli alınarak V-biçimli kuantum teli ve şekil 4.8.B'de her iki eksende de üçgen kuyu potansiyeli alınarak üçgen kombinasyon kuantum teli olmak üzere farklı biçimli kuantum telleri elde edilmiştir. V-biçimli kuantum telleri teknolojide lazer uygulama alanına sahip olduğundan son yıllarda büyük ilgi görmektedir (Kim vd., 2000; Deng vd., 2001; Kasapoğlu vd., 2003). Ayrıca kuantum tellerinde geometik etkiler birçok araştırmanın konusu olmuştur.

x yönünde uygulanan elektrik alan ve *z* yönünde uygulanan manyetik alan altında farklı biçimli kuantum tellerinde yabancı atom yokken sistemin Hamiltonyen'i a^* ve R^* birimlerinde,

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \eta x + \frac{\gamma^2}{4}(x^2 + y^2) + V(x, y) \tag{4.18}$$

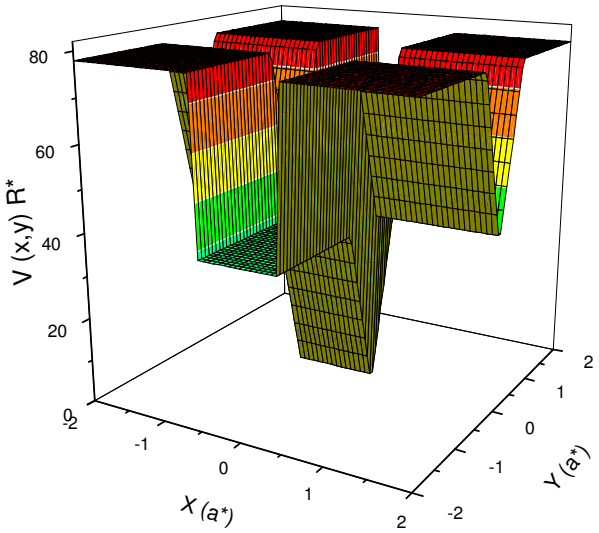
olarak alınır. Burada $\eta = |e| a^* F(kV/cm)/R^*$ (F elektrik alan şiddeti) ve $\gamma = e\hbar B / 2m^* cR^*$ (B, Tesla cinsinden manyetik alan şiddeti) sırasıyla elektrik ve manyetik alanın boyutsuzluk parametreleridir.

Sisteme $(x_i, y_i, 0)$ noktasında bulunan bir yabancı atom katılırsa bu durumda Hamiltonyen'i

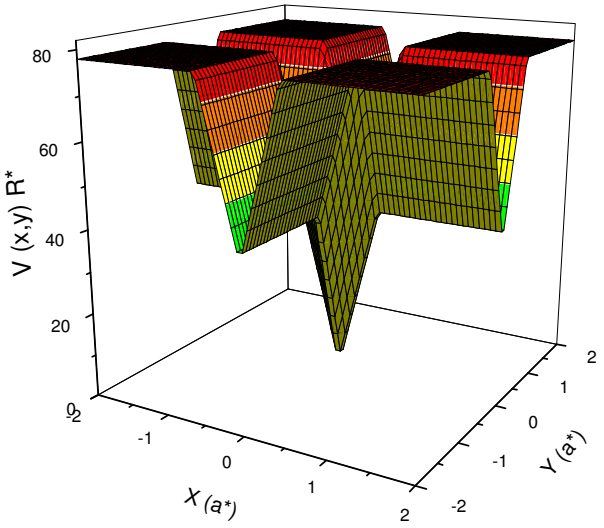
$$H_1 = H_0 - \frac{2}{\sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2}} \tag{4.19}$$

olarak alırız. Burada $\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}$ yabancı atom ile elektron arasındaki mesafe, ε elektronun hareket ettiği ortamın dielektrik sabitidir ε=12.5 alınmıştır. Daha sonra bölüm 4.1'de anlatıldığı gibi varyasyonel yöntemle bağlanma enerjileri hesaplanmıştır. Yabancı atomun tellerin merkezinde olduğu kabul edilmiştir

A



B



Şekil 4.8. A. Kare-üçgen potansiyelli kuantum teli (V-biçimli kuantum teli)

B. Üçgen-üçgen potansiyelli kuantum teli (üçgen kombinasyonu kuantum teli)

Denklem 4.18'de sistemin potansiyeli,

$$V(x, y) = V(x) + V(y), \tag{4.20}$$

alınmıştır. Burada, *V(x)* ve *V(y)*

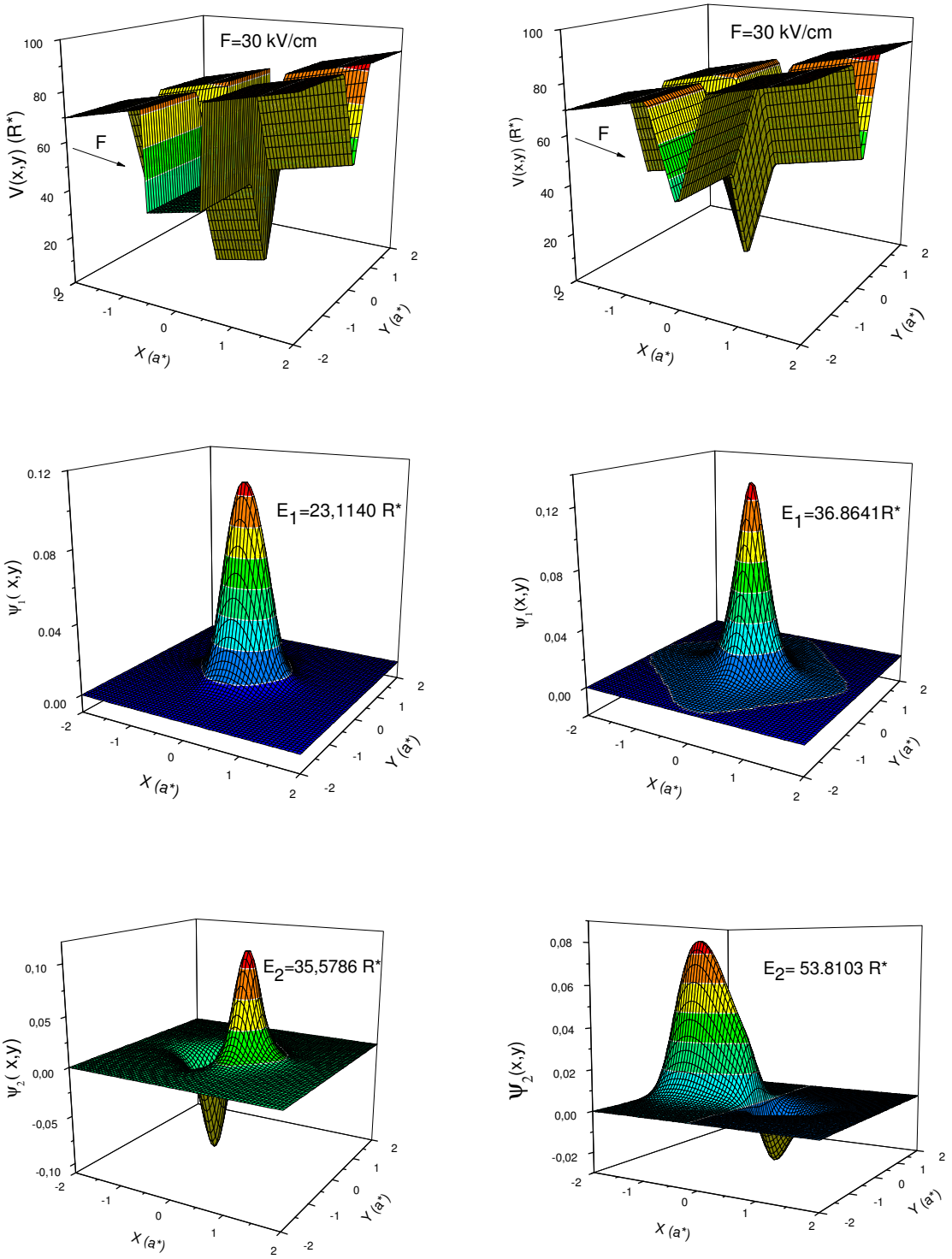
$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \le \frac{L_x}{2} \\ V_0 & |x| \rangle \frac{L_x}{2} \end{cases} \qquad V(y) = \begin{cases} \frac{2V_0 y}{L_y}, & |y| \le \frac{L_y}{2} \\ V_0 & |y| \rangle \frac{L_y}{2} \end{cases} \tag{4.21}$$

olarak verilir. V_0=228 *meV* olarak alınmıştır.

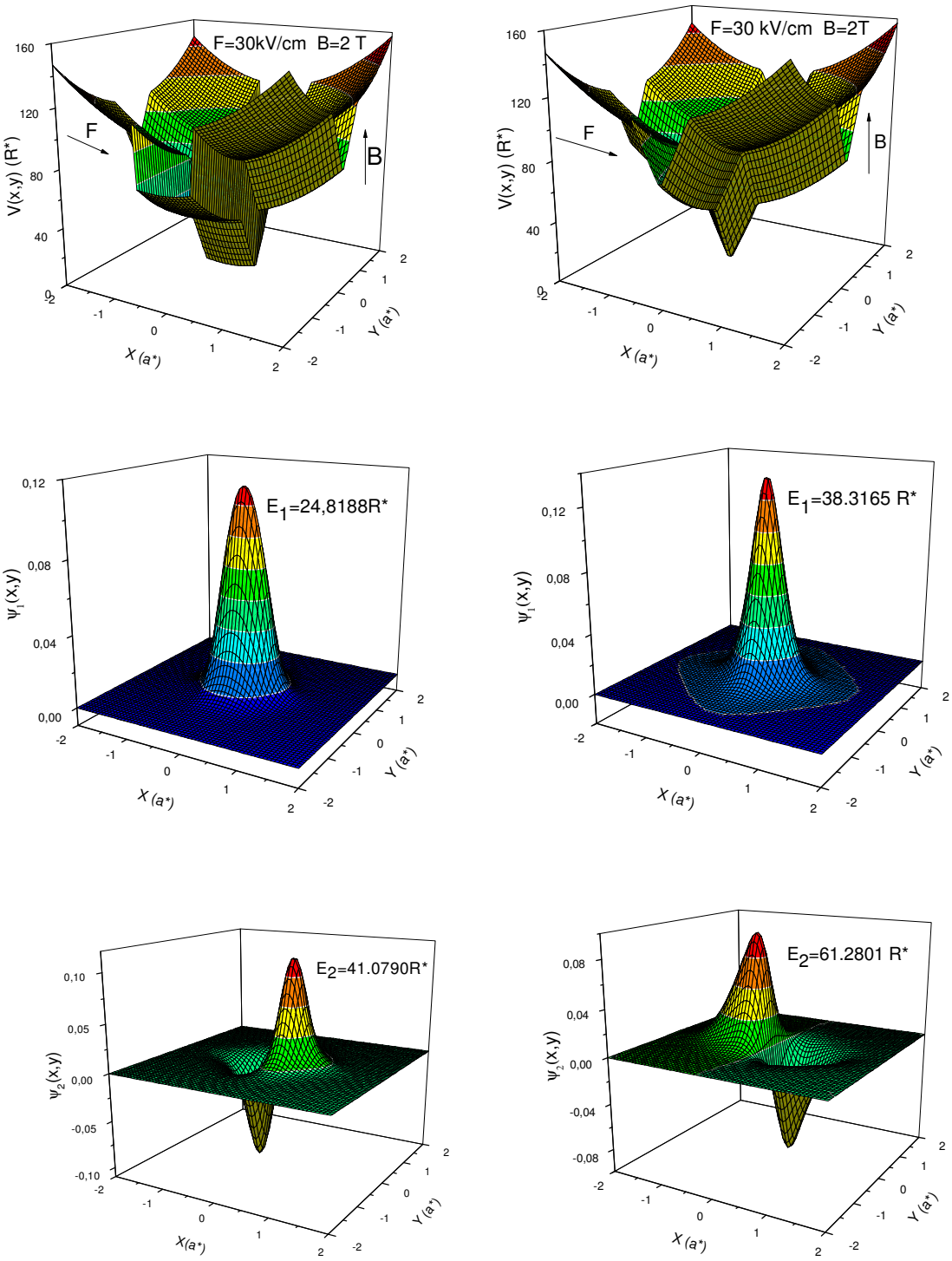
Taban durum ve 1. uyarılmış durum için enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları elektrik alan yokken çalışılmıştır. V-biçimli kuantum teli için, taban durum enerjisi 25.3933 *R** olarak, 1. uyarılmış durum enerjisi de 39.1156 *R** olarak hesaplanmıştır. Üçgen kombinasyonu kuantum teli için ise taban durum ve 1. uyarılmış durum enerjileri sırasıyla 37.5581 *R** ve 58.2453 *R** olarak bulunmuştur.

Şekil 4.9'da $F = 30\ kV/cm$ elektrik alan şiddeti altındaki her iki kuantum telinde taban ve 1. uyarılmış durum için enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları gösterilmiştir. *x* yönünde uygulan elektrik alan polarizasyona neden olur ve beklendiği gibi enerji durumları değişerek enerji özdeğerleri azalır. Enerji özdeğerlerinin azalışı şekilden görüldüğü gibi 1. uyarılmış durumlar için daha belirgindir. Ayrıca üçgen kombinasyonu teli için dalga fonksiyonunun simetrisinin elektrik alanın tersi yönünde değiştiği gözlenmiştir. Aynı özellik V-biçimli kuantum teli için yoktur. Bu yüzden, üçgen kombinasyonu bir kuantum telinden çok bir kuantum kuyusunun karakteristiklerini göstermektedir ve bu teknolojik önemi olabilecek bir özellik olarak kullanılabilir.

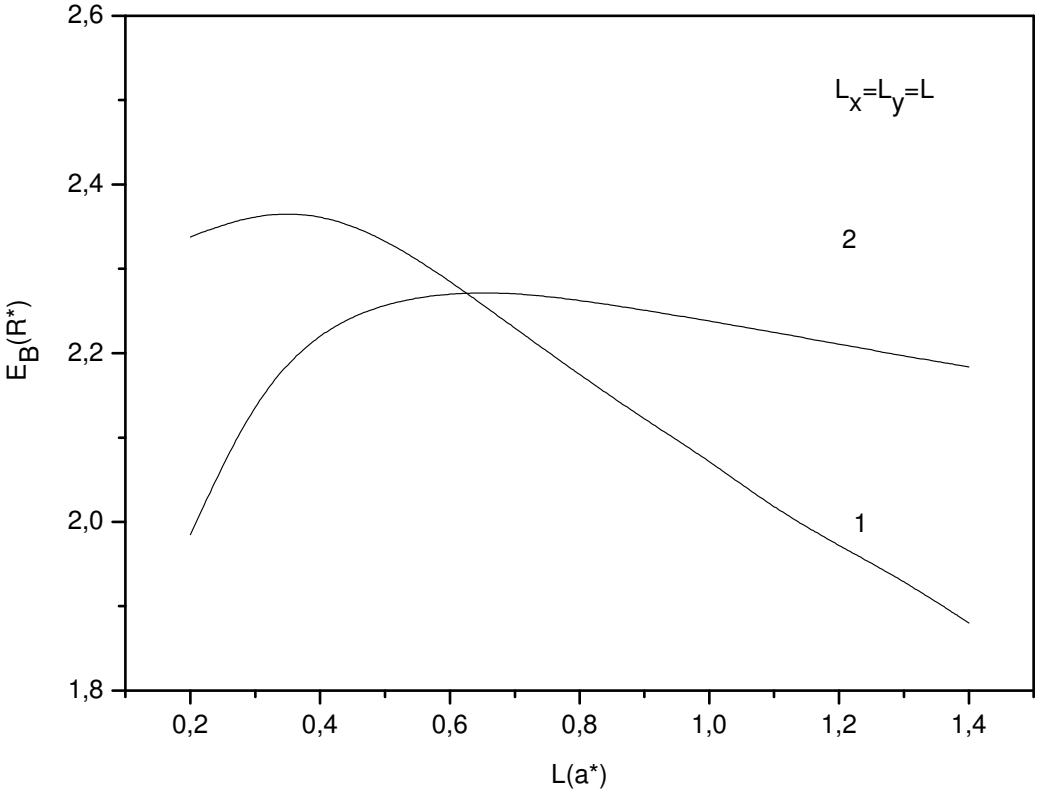
Manyetik alanın yapılar üzerindeki etkisi elektrik alanla birlikte Şekil 4.10'da gösterilmiştir. Manyetik alan elektron dalga fonksiyonun sınırlandırılmasını arttırmaktadır ve bu da hem taban hem de 1. uyarılmış durum enerji özdeğerlerinde bir artışa neden olmaktadır. Ayrıca, üçgen-üçgen kuantum teli için elektrik alanın neden olduğu dalga fonksiyonun antisimetrik özellikleri manyetik alan tarafından yok edilmektedir.



Şekil 4.9: *x*-yönünde uygulanan elektrik alan altında (F=30kV/cm) farklı biçimli kuantum tellerinde potansiyel profilleri ile taban durum ve 1. uyarılmış durum dalga fonksiyonları.



Şekil 4.10: *x*-yönünde uygulanan elektrik alan (F=30kV/cm) ve *z*-yününde uygulanan manyetik alan (B=2T) altında farklı biçimli kuantum tellerinde potansiyel profilleri ve taban durum ve 1. uyarılmış durum dalga fonksiyonları.

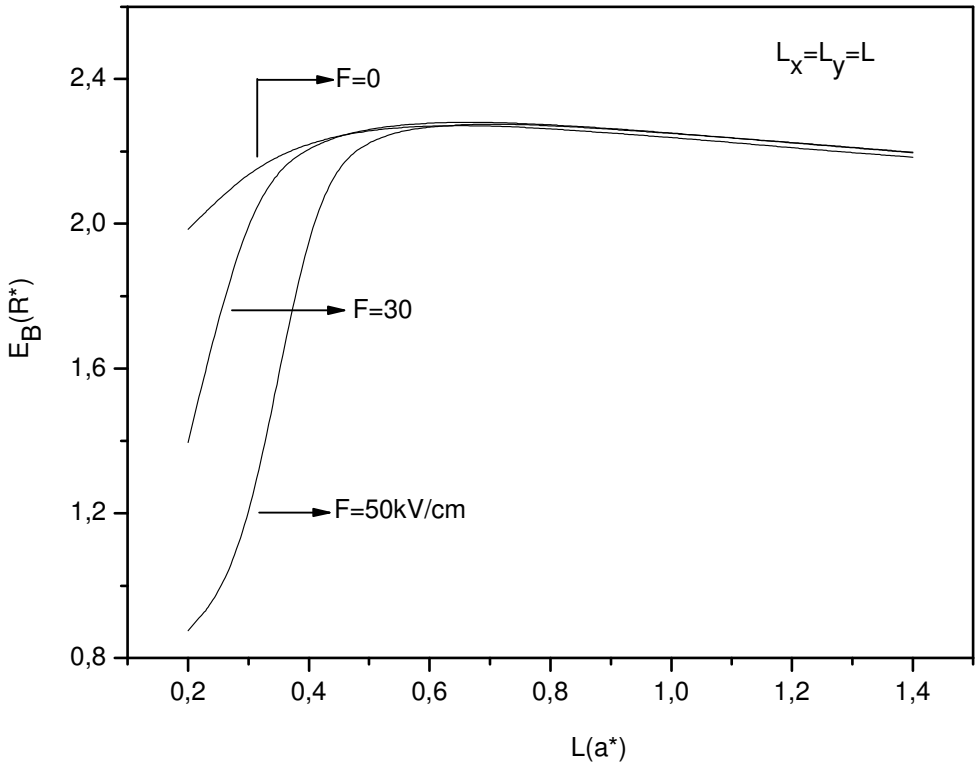


Şekil 4.11: Farklı biçimli kuantum tellerinde bağlanma enerjisinin tel genişliği ile değişimi 1. eğri V-biçimli kuantum teli için, 2. eğri ise üçgen kombinasyonu kuantum teli içindir.

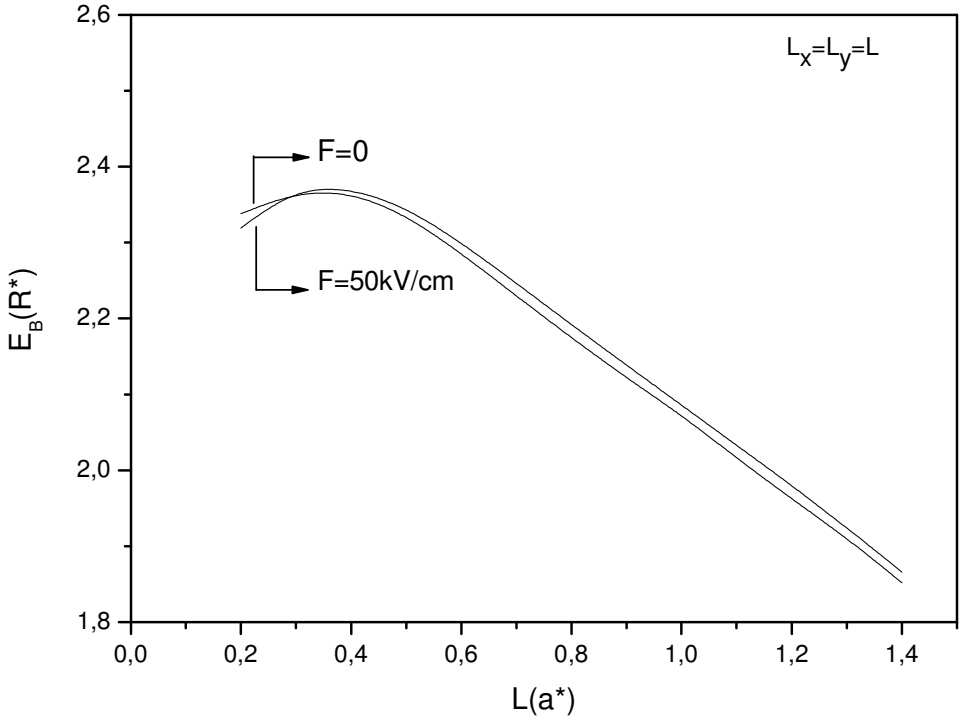
Şekil 4.11'de elektrik ve manyetik alan yokken, telin merkezinde bulunan yabancı atomun bağlanma enerjisinin değişimi tel genişliğinin fonksiyonu olarak gösterilmiştir.bu sonuçlar önceki çalışmalarla uyumludur (Sarı vd. 2004). Şekil 4.11'deki 1. eğri bağlanma enerjisinin V-biçimli kuantum telinin genişliği ile değişimini, 2. eğri ise üçgen kombinasyonu telinin genişliği ile değişimini göstermektedir. Şekilden her iki tel içinde bağlanma enerjisinin maksimum bir değere ulaşıncaya kadar arttığını ve sonra teldeki elektron sınırlarındaki değişim yüzünden azalmaya başladığı görülmektedir. Tel genişliklerinin küçük sınırlı bir değere azaltılmasıyla yabancı atoma bağlı elektronun dalga fonksiyonu telden dışarı sızmaya başlar ve bağlanma enerjisi azalmaya başlar.

Şekil 4.12'de üçgen kombinasyonu kuantum telinde uygulanan üç elektrik alan şiddeti için, bağlanma enerjisi tel genişliğinin fonksiyonu gösterilmiştir. Elektrik alan yokken, bağlanma enerjisi artan tel genişliği ile $L = 0.5\, a^*$ kritik değerine kadar artmaktadır. Kritik değerden daha geniş teller için yabancı atom ve elektron arasındaki zayıf Coulomb etkileşmesinden dolayı bağlanma enerjisinde küçük bir azalma görülmektedir. F=30kV/cm ve F=50kV/cm elektrik alanları uygulandığında ise, Coulomb etkileşmesinden dolayı bağlanma enerjisi elektrik alansız duruma kıyasla bir azalma gösterir. Elektrik alan elektronu telin sol kısmında tutmaya çalıştığı için, kritik bariyer genişliği biraz daha büyük bir değere gider. Sonunda bağlanma enerjisi tekrar elektrik alansız durumundaki değerine döner. Aynı hesaplamalar şekil 4.13'de V-biçimli kuantum teli için verilmiştir. Bağlanma enerjisi biçime bağlı olarak daha güçlü sınırlamadan dolayı elektrik alan şiddetine neredeyse duyarsız kalır.

Bu çalışmaların sonucu olarak farklı biçimli kuantum tellerinde bağlanma enerjisinin yapısal geometriye ve ayrıca dışarıdan uygulanan elektrik ve manyetik alana kuvvetli olarak bağlı olduğu görülmüştür. Sonlu farklar yönteminin bu tür hesaplamalarda etkin ve kullanışlı olduğu görülmüş ve ayrıca kuantum tellerinin farklı biçim kombinasyonlarının teknolojik uygulamalarda kullanılabilir tamamen farklı karakteristik davranışlar gösterdiği gözlenmiştir. Bulduğumuz bu sonuçlar deneysel çalışmalarda da kullanılabilir.

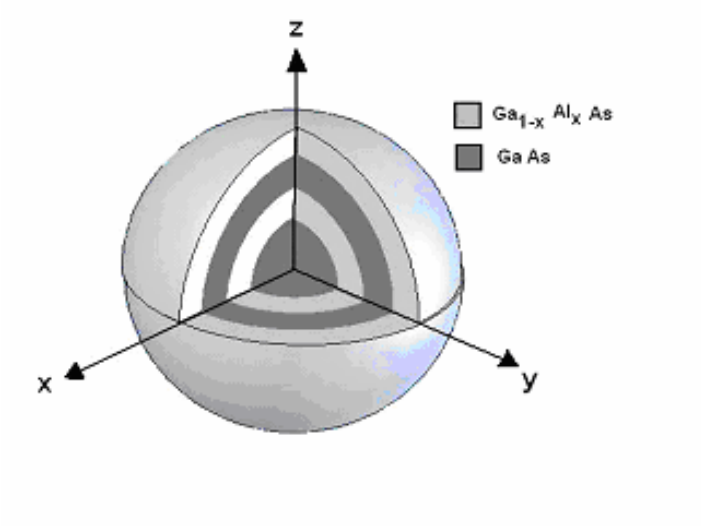


Şekil 4.12: Farklı elektrik alan şiddetleri altında üçgen kombinasyonu kuantum telinde bağlanma enerjisinin tel genişliği ile değişimi.



Şekil 4.13: Farklı elektrik alan şiddetleri altında V-biçimli kuantum telinde bağlanma enerjisinin tel genişliği ile değişimi.

4.3. Eşmerkezli Küresel Kuantum Noktasında Yabancı Atom Problemi



Şekil 4.14: Eşmerkezli küresel kuantum noktası

Etrafı $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrilmiş GaAs içinde bir elektronun hareketi üç boyutta sınırlanmış ise bu sisteme GaAs kuantum noktası denir. Elektronların sınırlandırılmasından dolayı kuantum noktalarındaki enerji seviyeleri atomlarda olduğu gibi kuantize olur. Bu yüzden kuatum noktalarının fiziği, atomik fizikte meydana gelen kuantum olayları ile paralellik gösterir (Saften 2007). Kuantum noktalarına yabancı atom katılmasıyla iletkenlik kontrollü bir biçimde değiştirilebilir. Kuantum noktaları küp, küre ve disk gibi değişik biçimlerde üretilebilirler. Biz bu çalışmada eşmerkezli $Ga_{1-x}Al_xAs$/GaAs küresel kuantum noktasını ele aldık.

Eşmerkezli küresel $Ga_{1-x}Al_xAs$/GaAs kuantum noktası için sistemin Hamiltonyen'i küresel koordinatlarda

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] + V(r) \qquad (4.22)$$

olarak yazılabilir. ψ dalga fonksiyonu (r,θ,φ) koordinatlarının bir fonksiyonu olur. Burada potansiyel fonksiyonu;

$$V(r)=\begin{cases}0 & 0\le r\le R_1\\ V_0 & R_1\le r\le R_2\\ 0 & R_2\le r\le R_3\\ \infty & R_3\le r\le\infty\end{cases} \tag{4.23}$$

olarak verilmektedir. V_o= 228meV ve dış tel potansiyeli sonsuz alınmıştır. Şekil 4.15'de sistemin iki boyutlu potansiyel profili gösterilmiştir.

Potansiyel sadece r değişkenine bağlı olduğundan, değişken ayırımı yöntemini uygulayabiliriz. Bunun için

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi) \tag{4.24}$$

şeklinde bir çözüm arayalım. Kısmi türevleri alındıktan sonra, eşitliğin iki tarafı (RY) ile bölünür ve r ye bağlı terimler bir tarafa alınırsa

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial Y})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial Y}{\partial\phi^2}\right] \tag{4.25}$$

olur. Sol tarafta yalnızca r değişkenine bağlı bir ifade, sağ tarafta yalnız (θ,ϕ) değişkenlerine bağlı bir ifadeye eşit olmaktadır. Bu eşitliği her (r,θ,ϕ) değeri için sağlayabilmenin tek yolu, iki tarafın da aynı bir λ sabitine eşit olmasıdır. Buradan

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]R-\lambda R=0\\ &\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0\end{aligned} \tag{4.26}$$

denklemleri bulunur.

Bu denklemlerden birincisi sadece r koordinatına bağlı olup Radyal Schrödinger denklemi adını alır. Ayrıntılı çözümü bulmak için V(r) potansiyelinin verilmesi gerekir. İkinci denklemde ise V(r) potansiyeli yoktur. O halde tüm küresel simetrik potansiyeller için, dalga fonksiyonunun açısal bağlılığı aynı $Y(\theta,\phi)$ fonksiyonu ile belirlenmiş olacaktır. İlk önce açısal denklemin çözümüne bakılırsa

$$\lambda = l(l+1) \tag{4.27}$$

ve

$$Y_l^m(\theta,\phi) = N_{LM} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \begin{cases} l = 0,1,2,.... \\ m = -l,.....,-1,0,1,.....,l \end{cases} \tag{4.28}$$

olarak bulunur. Burada Y_l^m küresel harmonikleri P_l^m ise legendre polinomlarını gösterir.

Küresel harmoniklerin tanımından, taban durumu için ($l = 0,\ m = 0$) açısal denklemin çözümünü

$$Y_O^O(\theta,\phi) = \left[\frac{1}{4\pi}\right]^{1/2} \tag{4.29}$$

olarak bulunur (Karaoğlu, 1994). Tüm küresel simetrik potansiyeller için, dalga fonksiyonunun açısal kısmının $Y_l^m(\theta,\phi)$ olduğu bilindikten sonra, radyal Schrödinger denkleminde $\lambda = l(l+1)$ özdeğerini yerine koyarsak

$$\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{2m^* r^2}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2}\right] R(r) = 0 \tag{4.30}$$

olur. Yine taban durumu için $l = 0$ yukarıdaki denklem tekrar yazılırsa;

$$\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{2m^* r^2}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] R(r) = 0 \tag{4.31}$$

buluruz. Bu denklemin çözümü için V(r) potansiyelinin verilmiş olması gerekir. Bu radyal Schrödinger denklemini sonlu farklar yöntemi ile çözüyoruz. Denklem (4.31) a^* ve R^* birimlerinde,

$$\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) + r^2\left[E - V(r)\right] R(r) = 0 \tag{4.32}$$

olur. Buradaki potansiyel fonksiyonu denklem (4.23)'de tanımladığımız formda alınarak taban durum enerjisini ve dalga fonksiyonunu sonlu farklar yöntemi ile hesaplıyoruz.

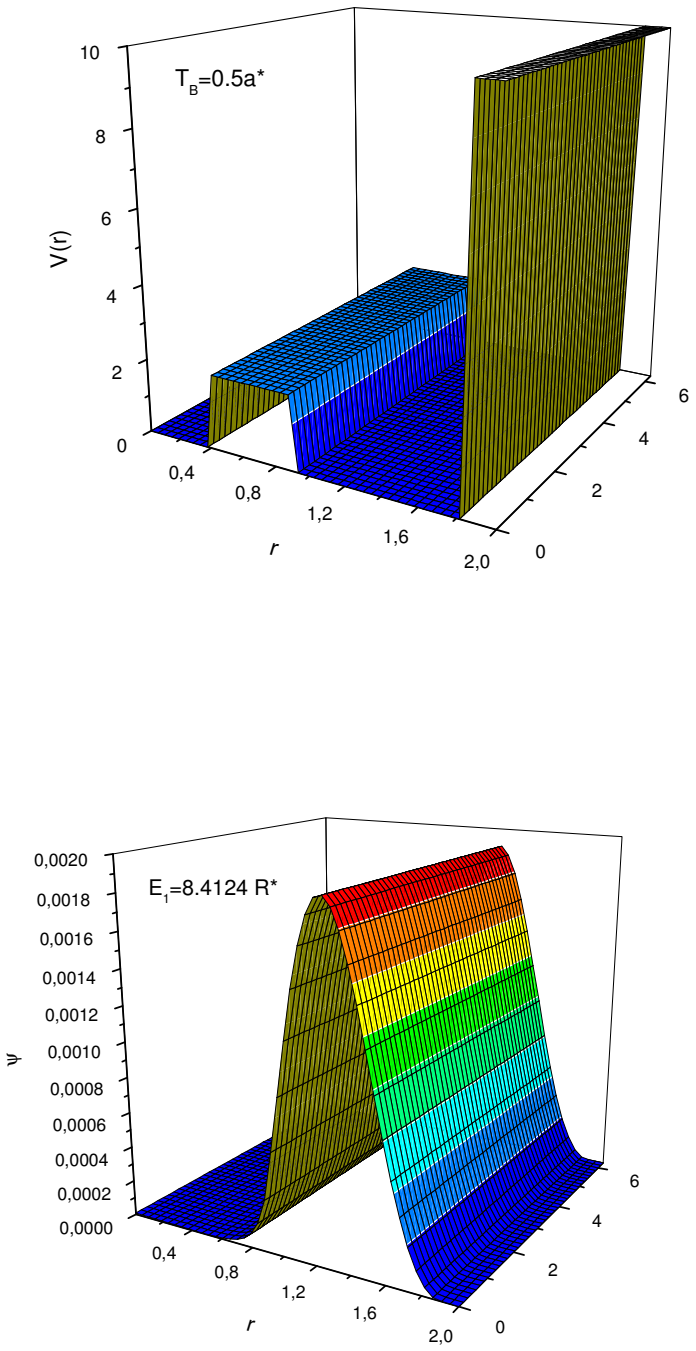
Sisteme yabancı atom kattığımızda ise $-\frac{e^2}{\varepsilon r}$ terimi sadece r' ye bağlı olduğundan açısal denklem çözümünde bir değişiklik olamayacak ve bu terim radyal denkleme ilave edilecektir. Buna göre (4.32) denklemi tekrar yazılırsa;

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+r^2\left[E-V(r)+\frac{2}{r}\right]R(r)=0 \qquad (4.33)$$

olur. Önceki bölümlerde açıklandığı gibi sonlu farklar yöntemi ile yabancı atom yokken çözüm bulunduktan sonra sisteme yabancı atom katılmasıyla varyasyon yöntemi kullanılarak yabancı atom bağlanma enerjileri hesaplanır.

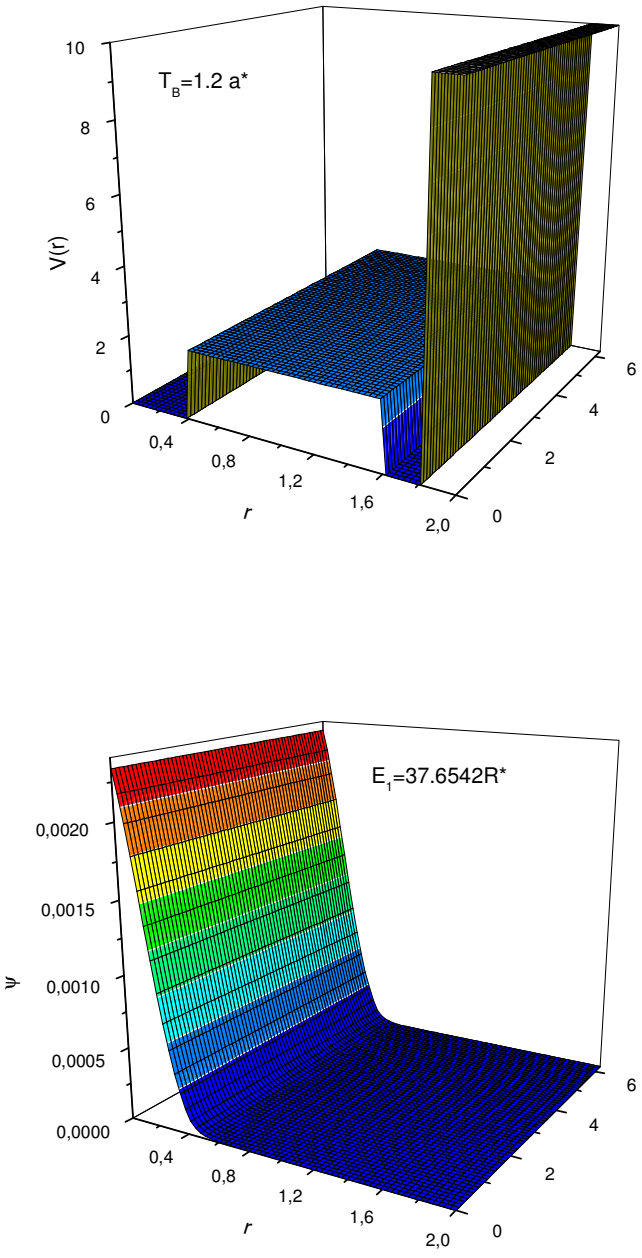
Bu bölümde dielektrik sabiti sistemin her yerinde aynı ($\varepsilon=12.5$) alınmış ve sonuçlar a^* ve R^* birimleri cinsinden verilmiştir ($a^*\cong 98$ Å ve R^*=5.83 *meV)*.

Eşmerkezli küresel kuantum noktası için iki boyutta potansiyel profili şekil 4.15 A'da ve taban durum dalga fonksiyonu şekil 4.15.B' de gösterilmiştir. Bu şekillerde, bariyer genişiliği 0.5 a^* ve potansiyel yüksekliği 223*meV* alınmıştır. İç nokta kalınlığı 0.4 a^* dır. Şekilden görüldüğü gibi taban durum dalga fonksiyonu dış kuantum noktasında yer almıştır. Şekil 4.16' da bariyer genişiliğini 1.2 a^* yaptık. Yapı tek kuantum noktası özelliğini gösterdi. Elektron tamamen iç kuantum noktası içinde oldu. Bu şekillerden yapının geometrik özelliklerinin bağlanma enerjisini etkileyeceğini gördük. Bundan dolayı şekil 4.17'de bariyer genişliği ile bağlanma enerjisinin değişimini inceledik. Bağlanma enerjisinde bulunan sonuçlar beklenildiği gibidir. Bariyer genişiliğinin artmasıyla bağlanma enerjisi 0.8 a^* değerine kadar azalmıştır. Bu değere kadar artan bariyer genişliği ile elektron ile yabancı atom arasındaki azalan Coulomb etkileşmesinden dolayı bağlanma enerjisi azalmaktadır. $T_B\approx 0.9a^*$ kritik bariyer kalınlığında ise keskin bir artış gördük. Bu davranış elektronun dış kuantum noktasından iç kuantum noktasına doğru yönelmesindendir. Kritik bariyer genişliğinden sonraki değerlerde ise elektron tamamen iç kuantum noktasında yer alır. Bağlanma enerjisi sabit bir değerde kalır. Yapı artık tek bir kuantum noktası özelliğini gösterir.

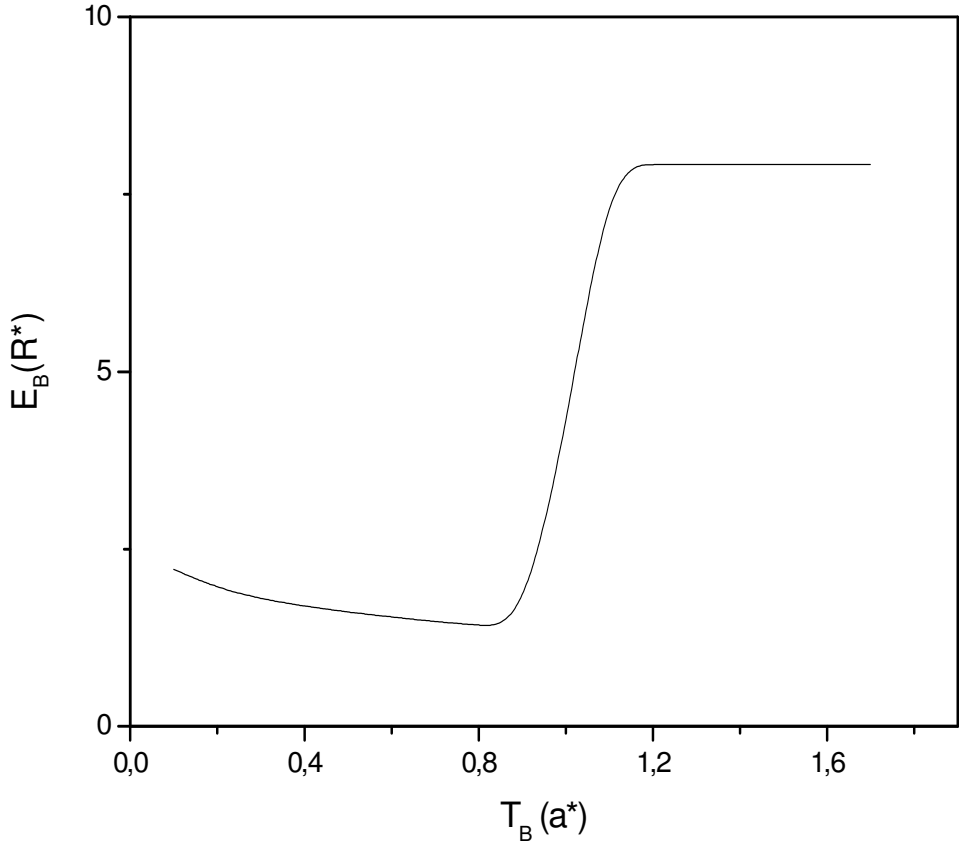


Şekil 4.15.A: Eşmerkezli küresel kuantum noktasının iki boyutlu potansiyel profili

B: Eşmerkezli küresel kuantum noktasının iki boyutlu taban durum dalga fonksiyonu.



Şekil 4.16: Bariyer genişliği T_B=1.2 a* için iki boyutlu potansiyel profili ve taban durumu dalga fonksiyonu.



Şekil 4.17: Eşmerkezli küresel kuantum noktasının merkezinde bulunan yabancı atomun bağlanma enerjisinin bariyer genişliği ile değişimi.

KAYNAKLAR:

1. AKBAŞ H., EKMEKÇİ S., AKTAŞ Ş., TOMAK M., 1995, "Electric field effect on shallow impurity states in multiple quantum-well structure" *Tr. J. Of Physics,* **19**, 381.

2. AKBAŞ H, AKTAŞ Ş., OKAN Ş.E., ULAŞ M., TOMAK M., 1998, "Screening effect on the binding energies of shallow donors, acceptors and excitons in finite barrier quantum wells", *Superlatt. and Microstruct.* **23**, 113.

3. AKTAŞ Ş., OKAN Ş.E. AKBAŞ H., 2001, "Electric field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in coaxial GaAs quantum-well wires", *Superlatt. And Microstruct.* **39**, 129.

4. AKTAŞ Ş., 1998 "Düşük boyutlu $Al_xGa_{1-x}As$/GaAs sistemlerin elektronik özellikleri" Doktora tezi , T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne.

5. AKTAŞ Ş., BOZ F. K., DALGIÇ S. S., 2005, "Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in coaxial GaAs quantum-well wire" *Physica E* **28***,* 96.

6. AKANKAN O., OKAN S.E., AKBAŞ H., 2006, "Spatial electric and axial magnetic fields effect in GaAs-AlAs quantum wires", *Physica E* **36**, 119.

7. AN X. T., LIU J.J, 2006, " Hydrogenic impurities in parabolic quantum well-wires in a magnetic field" *J. Appl. Phys.* **99***,* 123713.

8. BOZ F.K., AKTAŞ, Ş., 2005, "Magnetic field effect on the binding energy of s hydrogenic impurity in coaxial GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ quantum well-wires" *Superlatt. and Microstruct.,* **37**, 281.

9. BOZ F.K., 2005, "Düşük boyutlu yapılarda yabancı atom problemi ve eksitonlar", Doktora tezi , T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne.

10. BLOSS W.L., 1989, “Electric field dependence of quantum-well eigen states” J. Appl. Phys. **65 (12),**4789.

11. BRANIS S. V., LI G., BAJAJ K.K., 1993, “Hydrogenic impurities in quantum wires in the presence of a magnetic field” *Phys. Rev. B,* **47**, 1316.

12. DENG Z-Y., OHJI T., 2001, “Exciton binding energy in V-shaped GaAs–$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum wires”, *Solid State Communications* **118,** 557.

13. DUQUE C.A., MONTES A., MORALES A.L, 2001, “Binding energy and polarizability in GaAs quantum well wires” *Physica B,* **302**, 84.

14. ERDOĞAN I., AKANKAN O., AKBAŞ H., 2006 “Elecric and magnetic field effects on the self-polarization in GaAs/AlAs cylindirical quantum well-wires” *Physica E*, **33**, 83.

15. GRADSHTEYN I.S., RYZHIK I.M., 1980, “Table of Integrals, Series and Products”, Academic Pres, Florida.

16. KARAOĞLU B., 1994 “Kuantum Mekaniğine Giriş”, Bilgitek yayıncılık, İstanbul.

17. KARAOĞLU B., 1996, “Fizik ve Mühendislikte Matematik Yöntemler”, 2. basım, Bilgitek yayıncılık, İstanbul.

18. KASAPOĞLU E. SARI H. SÖKMEN I. 2003, “Geometrical effects on shallow donor impurities in quantum wires” *Physica E,* **19**, 332.

19. KITTEL C, 1996, “Katıhal Fiziğine Giriş” (Bekir Karaoğlu), 6. basım, 224, Bilgitekyayın., İst.

20. KIM T. G., WANG X. –L, SUZUKI Y., KOMORI K., OGURA M., 2000, “Characteristics of the Ground State Lasing Operation in V-groove Quantum-Wire Lasers” *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, **6,** 511.

21. KÖKSAL F, 1992, "Fenciler İçin Kuantum Kimyası", 173, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun.

22. LEE J., SPECTOR HN, 1983, "Impurity-limited mobility of semiconducting thin wire" *J. Appl. Phys.* **54**, 3921.

23. MANASELYAN A.KH., AGASYAN M. M., KIRAKOSYAN A.A. 2002, "The mobility of charge carries in a size-quantized coated semiconductor wire", *Physica E,* **14** ,366.

24. MASALE M., CONSTANTINOU N.C., TILLEY D.R., 1992, "Single-electron energy subbands of a hollow cylinder in an axial magnetic field" *Phys. Rev. B*, **46**, 15432.

25. MIKHAILOV I.D., ESCORCIA R., ORTEGA J.S.,2000, "The binding energies of shallow donor impurities in GaAs-(Ga,Al)As Coaxial Quantum-well wires" *Phys. Status Solidi (b)*, **220**, 195.

26. MONTES A., DUQUE C.A., PORRAS-MONTENEGRO N., 1998, "Density of shallow-donor impurity states in rectangular cross section GaAs quantum-well wires under applied electric field", *J. Physc.: Condens. Matter*, **11**, 5351.

27. MOGHRABY D. E., JOHNSON R.G., HARRISON P. 2002, "Calculating modes of quantum wire and dot systems using a finite differencing technique", *Computer Phys. Commun.* **150**, 235.

28. NICULESCU E. GEARBA A., CONE G., NEGUTU C., 2001, "Magnetic field dependence of shallow donors in GaAs quantum well-wires" *Superlatt.Microstruct.* **29**, 316.

29. OKAN S. E. , AKBAŞ. H. , AKTAŞ Ş. ,TOMAK M., 2000, "Binding energies of helium-like impurities in parabolic quantum wells under an applied electric field", *Superlatts and Microstructs*, **23**, 113.

30. OKAN S. E., ERDOGAN İ., AKBAŞ. H. ,2004, "Anomalous polarization in an electric field and self-polarization in GaAs/AlAs quantum wells and quantum well wires" *Physica E* **21**, 91.

31. ULAŞ M., AKBAŞ H. TOMAK M. ,1997, “Shallow donors in a quantum well wire: Electric field and geometrical effects”, *Phys. Stat. Sol.,* **200**, 67.

32. SARI H., KASAPOĞLU I., SÖKMEN I., 2003 “Shallow donors in a triple graded quantum well electric and magnetic field” *Physica B*, **325**, 300.

33. SAFTEN Y. ,2007, “Kuantum noktalarının sonlu farklar yöntemi ile çözümü”, Yüksek lisans tezi , T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne.

34. TSETSERI M., TRIBERIS G. P., 2002, “A study of the ground state of quantum wires using the finite difference method” , *Superlatt. and Microstruct.* **32**,79

35. ZOUNOUBI A., MESSAOUDI K.E., ZORKANI I., JORIO A. ,2001, “Magnetic field and finite barrier- height effects on the polarizability of a shallow donor in a GaAs quantum wire”, *Superlatt. and Microstruct* **30**,189.

36. CHAO HT, TRAN THOAI DB., 1995 “Effect of the electric on a hydrogenic impurity in a quantum-well wire”, *Physica B*, **205**, 273.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı **:** Abdullah BİLEKKAYA

Doğum yeri ve Yılı : Edirne-1978

Medeni Hali **:** Bekar

İş Adresi **:** Trakya Üniversitesi, Edirne Teknik Bilimler Meslek Yüksekokulu, Edirne.

Öğrenim Durumu:

1997-2001: T.Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü (Lisans)

2001-2003: T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (Yüksek Lisans)

Konu: Kuantum Kutularında Geometrik Etkiler.

2003- : T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı (Doktora)

Konu: Çoklu Kuantum Tel ve Noktalarının Elektronik Özellikleri.

Akademik Görevler:

2006- : T.Ü. Edirne Teknik Bilimler Meslek Yüksekokulu Öğretim Görevlisi

Katıldığı Bilimsel Toplantılar:

1- VI. Ulusal Düzensiz Sistemler Sempozyumu, 2006, Karaburun, İzmir

2- X. Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu, 2006, İstanbul

3- XI. Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu 2007, İstanbul

Yayınlar:

1-" İlginç Geometrili Kuantum Tellerinde Yabancı Atom Bağlanma Enerjisinin Elektrik ve Manyetik Alan Altında Hesaplanması" , VI. Ulusal Düzensiz Sistemler Sempozyumu, 2006, İzmir.

2- " Dışarıdan Uygulanan Elektrik ve Manyetik Alan Altında Çoklu Kuantum Tellerinin Sonlu Farklar Yöntemi ile Çözülmesi ", X. Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu, 2006, İstanbul.

3- " Electric Field Effect On The Binding Energy Of A Hydrogenic Donor Impurity In Quantum Well Wires Of Different Shapes" , XI. Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu 2007, İstanbul.

4- " The Energy Spectrum for an electron in quantum well wires with different shapes under the electric and magnetic field " , baskıda, Physica E, 2008.

5- " Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in quantum well wires of different shapes", Superlatt. Microst. dergisine gönderildi, 2008.