# KUANTUM NOKTASINDA ELEKTRİK ALAN VE SICAKLIĞIN BAĞLANMA ENERJİSİNE ETKİLERİ

**SERDİNÇ YENİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Hasan AKBAŞ**
**Edirne - 2009**

T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# KUANTUM NOKTASINDA ELEKTRİK ALAN VE SICAKLIĞIN BAĞLANMA ENERJİSİNE ETKİLERİ

SERDİNÇ YENİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. HASAN AKBAŞ

EDİRNE – 2009

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# KUANTUM NOKTASINDA ELEKTRİK ALAN VE SICAKLIĞIN BAĞLANMA ENERJİSİNE ETKİLERİ

Serdinç YENİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu Tez 15 / 09 / 2009 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Prof.Dr. Hasan AKBAŞ
Danışman

Yrd.Doç.Dr. Cengiz DANE
Üye

Yrd.Doç.Dr. İlhan ERDOĞAN
Üye

# TEŞEKKÜR

Tez çalışmamda, danışmanlığımı üstlenerek aydınlatıcı bilgilerinin yanında manevi desteğini benden esirgemeyen Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Hasan AKBAŞ ' a, her zaman yardımlarını gördüğüm Yrd. Doç. Dr. İlhan ERDOĞAN ' a katkılarından dolayı sonsuz teşekkürler…

Çalışmalarımda benden desteğini esirgemeyen, bilgilerinden faydalandığım, emeği geçen Olcay YAMAN ' a ,değerli eşim Suzan YENİ ' ye ve Trakya Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyelerine teşekkür ederim.

# İÇİNDEKİLER

**1.Giriş...…….. 1**

**2.Küresel Kuantum Noktası……...…….…… 2**

**3.Sonsuz Potansiyel Engelli GaAs/AlAs Küresel Kuantum Noktası……5**

**4.GaAs/AlAs Küresel Kuantum Noktasına Elektrik Alan Etkisi……..……7**

**5.GaAs/AlAs Küresel Kuantum Noktasında Donor Yabancı Atomu…….....12**

**a.Donor Yabancı Atomu Küre Merkezinde (GaAs)…….……...12**

**b.Donor Yabancı Atomu Küre Merkezin Dışında (AlAs)…….…....15**

**6.Sonsuz Potansiyel Engeli GaAs/AlAs Küre Kuantum Noktasında Düzgün Sabit Elektrik Alanın Bağlanma Enerjisine Etkisi……..….21**

**7.Donor Atomlu Sonsuz Potansiyel Engeli GaAs/AlAs Kuantum Küresinde Sıcaklığın Bağlanma Enerjisine Etkisi……..……..24**

**SONUÇ VE TARTIŞMA……..……...29**

**KAYNAKLAR……..…….…..…...30**

**ÖZGEÇMİŞ……..…….……..…..32**

# SİMGELER DİZİNİ

| | |
|---|---|
| m* | Elektronun etkin kütlesi |
| $\psi$ | Dalga fonksiyonu |
| $\lambda$ | Minimizasyon sabiti |
| E | Enerji |
| $a$ | Küre yarıçapı |
| $a^*$ | Etkin Bohr yarıçapı |
| $a_o$ | Bohr yarıçapı |
| $\eta$ | Hamiltonyendeki elektrik alan terimi |
| F | Elektrik alan şiddeti |
| $\beta$ | Varyasyonel parametre sabiti |
| $\nabla$ | Laplasyen |
| $\varepsilon$ | Dielektrik sabiti |

# ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Küresel Koordinatlarda değişkenlerin gösterimi…….....2
Şekil 3.1. Sonsuz küre kuantum noktası……..5
Şekil 4.1. Sonsuz kürede elektrik alan…….7
Şekil 5.1. Sonsuz kürede yabancı atom merkezde…….12
Şekil 5.2. Merkez dışında, $o\langle r_i \langle a$ ,yabancı atomlu kuantum küre noktası…….15

# GRAFİKLER DİZİNİ

Grafik 4.1. Sonsuz kürede enerjinin küre yarıçapına göre değişimi…….……...10
Grafik 4.2. Sonsuz kuantum küresinde temel durum subband enerjisinin dört farklı $a$ küre yarıçapı için $F$ elektrik alana göre değişim grafiği…….11
Grafik 5.1. Sonsuz kürede yabancı atom merkezde iken bağlanma enerjisinin küre Yarıçapına göre değişimi……..18
Grafik 5.2. Bağlanma enerjisinin $a$ küre yarıçapına bağlı olarak değişimi……....19
Grafik 5.3. Bağlanma enerjisinin yabancı atom konumuna bağlı olarak değişimi……..20
Grafik 6.1. Yabancı atomun bağlanma enerjisinin farklı elektrik alanlara göre değişimi....23
Grafik 7.1. Bağlanma enerjisinin iki farklı yabancı atom konumu ve iki farklı sıcaklık için küre yarıçapına bağlı olarak değişimi……...27
Grafik 7.2. Bağlanma enerjisinin sıcaklıkla değişim grafiği……....28

# 1.GİRİŞ

Laboratuar koşullarında MBE (Molecular Beam Epitaxy) ve LPE (Liquid Phase Epitaxy) teknikleri ile kuantum kuyu, tel ve nokta özelliğinde elektronik devre elemanları üretmek mümkündür. Bu tür devre elemanları yüksek hızlı, yani kısa sürede işlem yapabilmektedirler. Günümüzde üretilen ve geliştirilen bu devre elemanları, fizik ve elektronik dünyasında çok büyük ilgi görmektedir.

Bu çalışmada, teknolojide çok kullanılan ve gelecek vaad eden kuantum noktası çalışılmıştır. Kuantum noktası sonsuz potansiyeli GaAs/AlAs küresel nokta olarak seçilmiş, yabancı atomun yokluğunda ve varlığında bir elektronun alabileceği en düşük (taban durum) enerji, küre geometrisine ve yabancı atom konumuna bağlı olarak hesaplanmıştır.

Çalışmamızda dış etken olarak düzgün sabit elektrik alan ve sıcaklık göz önüne alınmıştır. Elektrik alanın ve sıcaklığın temel durum ve bağlanma enerjisine etkileri hesaplanmıştır.

Hesaplarımızda kuantum mekaniği esas alınmış olup, bir elektronlu sistemimiz için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi yaklaşık çözümlerden varyasyonel çözüm yöntemi kullanılarak nümerik ağırlıklı çözülmüştür.

Nümerik hesaplarda FORTRAN dili kullanılmış olup, programların hepsi tarafımızdan yazılmıştır.

## 2. KÜRESEL KUANTUM NOKTASI

Küre kuantum noktasında hapsedilen m* etkin kütleli bir parçacık için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi :

$$H_0\psi = E_0\psi \tag{2.1}$$

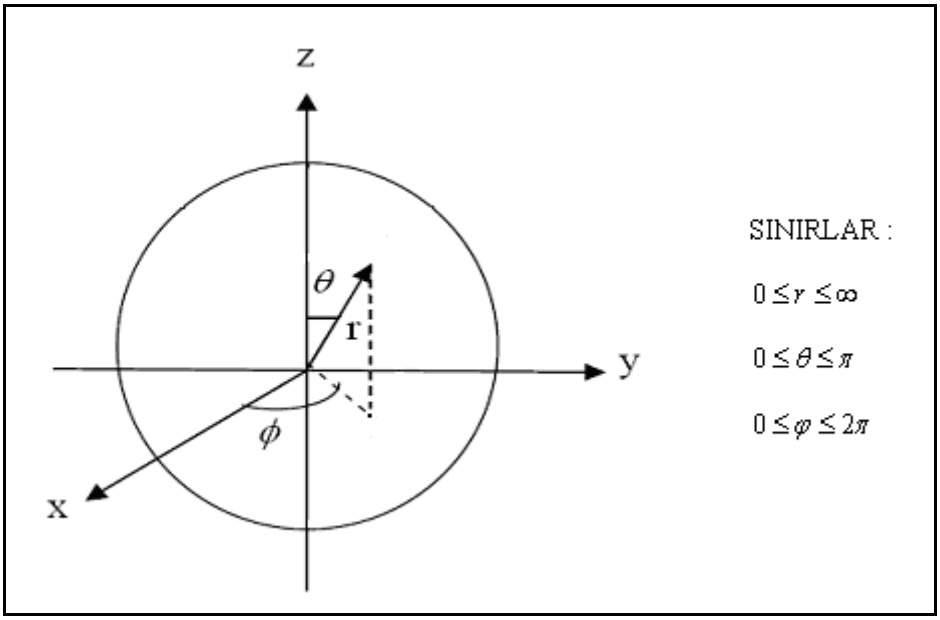
olup, parçacığın $H_0$ Hamiltoniyeni :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z) \tag{2.2}$$

olarak yazılır. Burada $V(x,y,z)$ küre engel potansiyelidir.

$V(x,y,z)$ potansiyeli küresel koordinatlarda yazılır ve bu potansiyel yalnız parçacığın r konumuna bağlı olursa, Schrödinger denkleminin çözümü daha kolay olur. Bu çalışmamızda dış etkinin yokluğunda küre potansiyel enerjisi, $V$, küresel simetriye sahip yani yalnız $r$ konumunun fonksiyonu olacak şekilde seçilecektir.

Genel anlamda, küresel koordinatlarda, potansiyel enerji $V(r,\theta,\varphi)$ olmak üzere hamiltoniyen ifadesi aşağıdaki gibi özetlenebilir:




Şekil 2.1. Küresel koordinatlarda değişkenlerin gösterimi

Şekil 2.1. de gösterildiği gibi r, kürenin yarıçapını, θ kutup açısını, φ de boylam açısını ifade eder. Bunların küresel koordinatlarda x, y ve z'nin karşılıkları :

$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\varphi \\ y &= r \sin\theta \sin\varphi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned} \qquad (2.3)$$

şeklinde yazılmaktadır.

Schrödinger denklemini küresel koordinatlarda yazmak için önce kısmi türevleri r, $\theta, \varphi$ değişkenleri cinsinden yazmak gerekir. x değişkeni ile r, $\theta, \varphi$ değişkenleri arasında zincir kuralı uygulayıp $\partial\psi / \partial x$ operatörü için bunu hesaplarsak :

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x} \qquad (2.4.)$$

Her kutupsal r, $\theta, \varphi$ koordinatlarının, her (x,y,z) koordinatına göre kısmi türevinin bulunması gerekir. Burada r, $\theta, \varphi$ değişkenlerinin (x,y,z) cinsinden ifadesi

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \qquad (2.5.)$$

$$\cos\theta = \frac{z}{r} \qquad (2.6.)$$

$$\tan\varphi = \frac{y}{x} \qquad (2.7.)$$

şeklindedir. Bu denklemlerin diferansiyelleri alınırsa:

$$rdr = xdx + ydy + zdz \qquad (2.8.)$$

$$-\sin\theta d\theta = \frac{rdz - zdr}{r^2} = \frac{zxdx + zydy + (z^2 - r^2)dz}{r^3} \qquad (2.9.)$$

$$\frac{1}{\cos^2\varphi} d\varphi = \frac{xdy - ydx}{x^2} \qquad (2.10.)$$

$\partial r / \partial x$ kısmi türevini bulmak için (2.2.) eşitliklerinde, y ve z değerleri sabit tutulursa

$$dy = dz = 0$$

olur. Bu eşitliklerin son hali;

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi \qquad (2.11.)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{zx}{r^3 \sin\theta} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r} \qquad (2.12.)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}\cos^2\varphi = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \qquad (2.13.)$$

şekline dönüşür. Tüm bu denklemler (2.3) eşitliğinde yerine konulduğunda :

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \qquad (2.14.)$$

eşitliği elde edilir. Buradan

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \quad , \quad \frac{d^2\psi}{dy^2} \quad , \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} \qquad (2.15.)$$

ifadelerinin karşılıkları bulunur ve küresel koordinatlarda Hamiltoniyen ve zamandan bağımsız Schrödinger denklemi sırası ile :

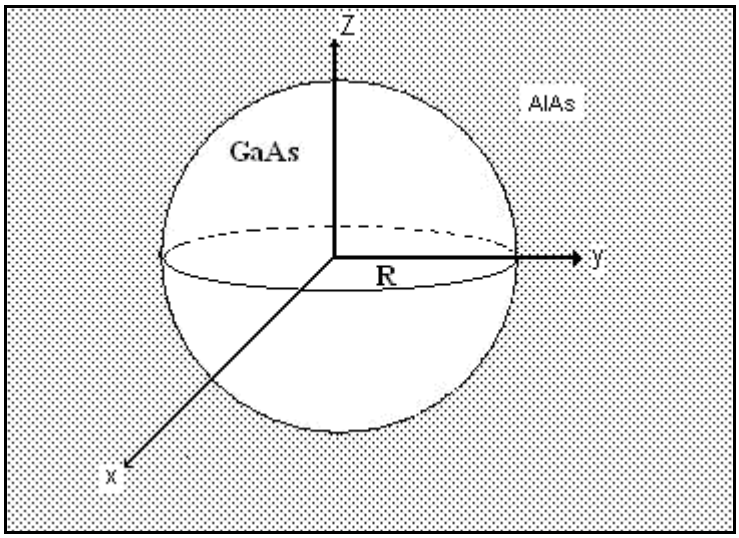
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2}{d\varphi^2}\right] + V(r,\theta) \qquad (2.16.)$$

ve

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2}{d\varphi^2}\right]\psi_{(r,\theta,\varphi)} + V(r,\theta)\psi_{(r,\theta,\varphi)} = E_0\psi_{(r,\theta,\varphi)} \qquad (2.17.)$$

şeklinde yazılır. Burada $\psi$ dalga fonksiyonu, r, $\theta$ , $\varphi$ koordinatlarının bir fonksiyonudur.

# 3. SONSUZ POTANSİYEL ENGELLİ GaAs/AlAs KÜRESEL KUANTUM NOKTASI




Şekil 3.1. Sonsuz küre kuantum noktası

GaAs/AlAs sonsuz potansiyel küresel kuantum noktası şekil (3.1.) ' de verilmiştir. Böyle bir kuantum küre noktası içinde bulunan bir parçacığın $V$ potansiyel enerjisi ,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \le a \\ \infty & r \rangle a \end{cases}$$

olur. Sistem için zamandan bağımsız Schrödinger denklemindeki $V$ potansiyel enerjisinin yalnız $r$ konumuna bağlı olduğundan $\psi$ dalga fonksiyonu da yalnız $r$ konumunun fonksiyonu olacaktır. Başka bir deyimle Hamiltoniyenin yalnız radyal kısmı ile işlem yapılacaktır.

Temel durum için, $l = 0$, radyal Schrödinger denklemi

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} \right) \right] R_{10}(r) = E_{10} R_{10}(r) \qquad (3.1.)$$

olur. Denklemin çözümü Bessel fonksiyonlarıdır.[Karaoğlu B.,1994]

Temel durum, $l$=0 için parçacık $E_{10}$ enerjisi :

$$E_{10} = \frac{\hbar^2}{2m*}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \tag{3.2.}$$

ve $R_{E0}$ radyal dalga fonksiyonu :

$$R_{10}(r) = \begin{cases} N\dfrac{\sin\dfrac{\pi}{a}r}{r} & r\langle a \\ 0 & r\rangle a \end{cases} \tag{3.3.}$$

olur.[ Paredes-Gutierrez vd.,1993]

$E_{10}$ enerjisi

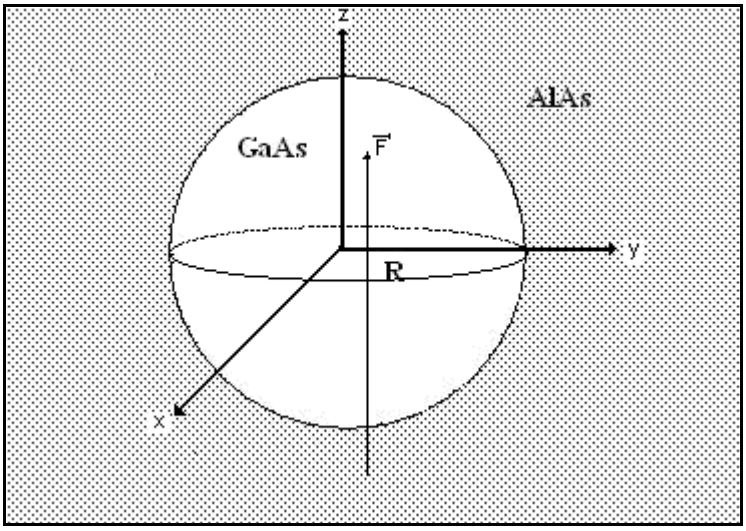
$$H_0 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m*}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\right)\right] \tag{3.4.}$$

olmak üzere enerjinin beklenen değeri olarak

$$E_{10} = \left\{\frac{\langle\psi_{10}(r)|H|\psi_{10}(r)\rangle}{\langle\psi_{10}(r)|\psi_{10}(r)\rangle}\right\} \tag{3.5.}$$

İfadelerinden bulunabilir.

# 4. GaAs/AlAs KUANTUM NOKTASINA ELEKTRİK ALAN ETKİSİ




Şekil 4.1. Sonsuz kürede elektrik alan

Şekil 4.1. ' deki gibi küre kuantum noktası düzgün sabit bir elektrik alan içinde ise küre içinde hapsedilmiş elektron için Schrödinger denklemindeki Hamiltoniyen elektrik alanın varlığından dolayı

$$H = H_0 + e\ F\ r\ \cos\theta \tag{4.1.}$$

olacaktır [Vazquez vd., 2004] . Burada $e$ elektron yükü, $F$ elektrik alanın büyüklüğü ve $\theta$ elektron konum vektör doğrultusu ile z ekseni arasındaki açı, yani $\theta$ kutup açısıdır. Böyle bir elektrik alan varlığında sistemin Schrödinger denklemi:

$$H\psi\left(r,\theta\right) = E\psi\left(r,\theta\right) \tag{4.2.}$$

veya

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m*}\nabla^2_{r,\theta} + eFr\cos\theta\right)\psi_{(r,\theta)} = E\psi_{(r,\theta)} \tag{4.3.}$$

olur.

Nümerik hesaplarda enerjiler R* etkin Rydberg, uzunluklar a* etkin Bohr yarıçapı biriminde seçilmiştir. Bu birim sisteminde

$$R^* = \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{1}{a^{*2}} \tag{4.4.}$$

ve

$$a^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m^* e^2} \tag{4.5.}$$

dir. Bu birim sisteminde,

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = 1 \tag{4.6.}$$

olur ve nümerik hesaplarda kolaylık sağlar. Hesaplarımızda GaAs için $\varepsilon$ dielektrik sabiti

$$\varepsilon = 12,5$$

ve m* elektron etkin kütlesi

$$m^*=0.067\ m_0$$

olmak üzere

$$a^* = 98.73\ A^o$$

ve

$$R^*=5.83\ meV$$

hesaplanmıştır. Bu birim sisteminde Schrödinger denklemi :

$$\left(-\nabla^2_{r,\theta} + \eta r\cos\theta\right)\psi\left(r,\theta\right) = E\psi\left(r,\theta\right) \tag{4.7.}$$

olur. Burada

$$\eta = eF \tag{4.8.}$$

ve a* ,R* birim sisteminde $F$ elektrik alan, kV/cm biriminde olmak şartıyla

$$\eta \cong 0.01\ \ F(kV/cm)$$

dir. Denklem (4.7.) ' nin çözümü için, varyasyonel çözüm ,

$$\psi(r,\theta) = N\frac{\sin\frac{\pi}{a}r}{r}e^{-\lambda r\cos\theta} \tag{4.9.}$$

deneme fonksiyonu kullanılmıştır[Perez vd.,2007]. Burada $\beta$ pozitif reel ,$\frac{1}{a^*}$ biriminde varyasyonel parametredir. Denklemdeki Laplasyen :

$$\nabla^2_{r,\theta} = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \tag{4.10.}$$

olur. Herhangi bir $\lambda$ değeri için enerjinin $E_\lambda$ beklenen değeri, subband enerjisi,

$$E_\lambda = \frac{\int_{r=0}^{a}\int_{\theta=0}^{\pi} dV\psi^* H\psi}{\int_{r=0}^{a}\int_{\theta=0}^{\pi} dV\psi^*\psi} \tag{4.11.}$$

olup, burada $dV$ hacim elemanı,

$$dV = 2\pi r^2\sin\theta dr d\theta \tag{4.12.}$$

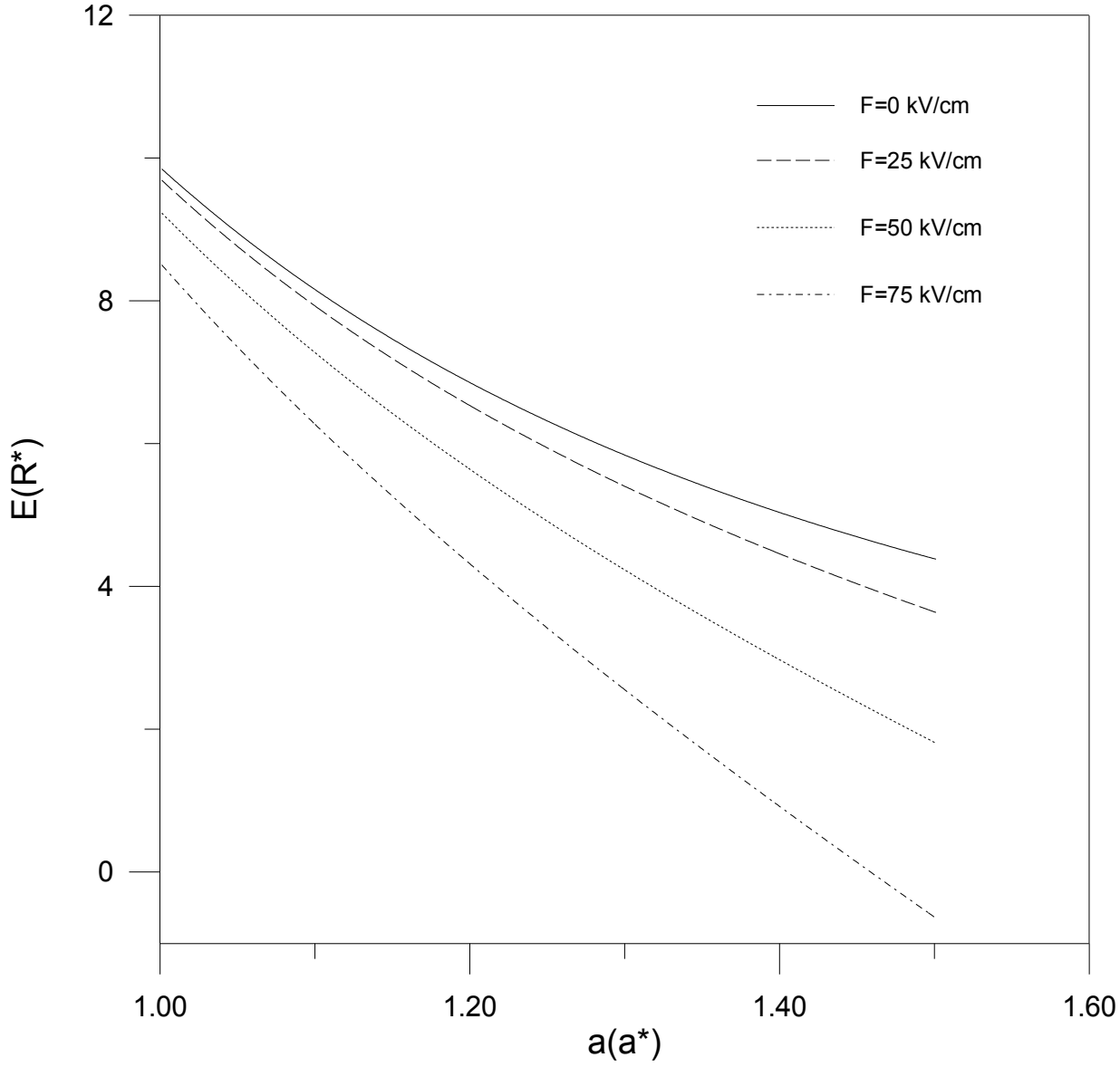
dir.

Denklem (4.11.) 'i kullanarak çok küçük artımlar ,$d\lambda = 0.001$, için çok sayıda $E_\lambda$ enerji değeri nümerik olarak bilgisayarda FORTRAN dilini kullanarak hesaplanmıştır.

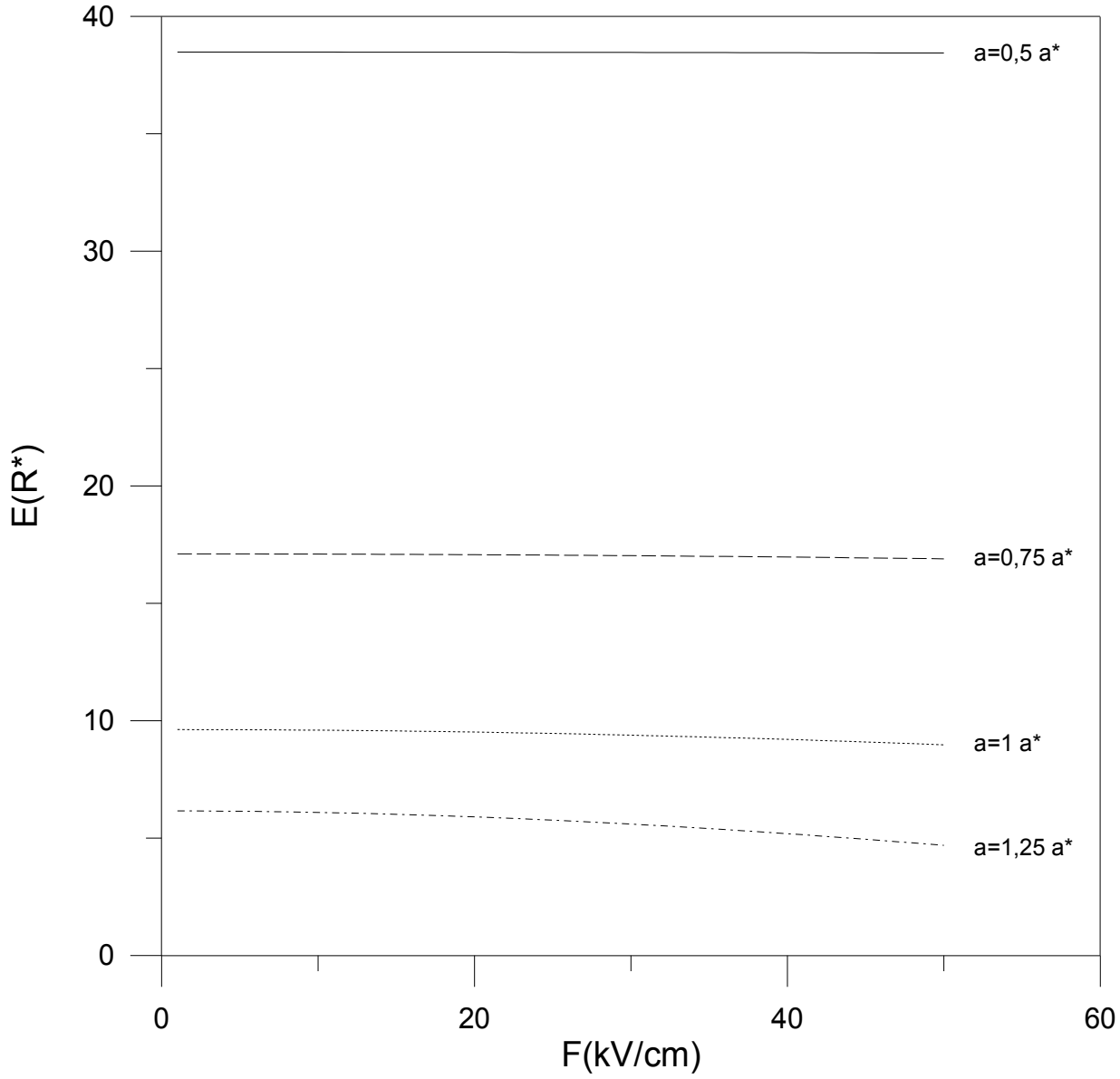
Bu enerji değerlerinden en küçüğü aranan enerji değerimizdir. Başka bir deyimle,

$$E_{cevap} = E = \min_{\lambda} E_\lambda$$

dir. Bu şartlarda ve anlatılan yöntemle dört farklı elektrik alan büyüklüğü için taban durum enerjisinin $a$ küre yarıçapına bağlı değişimleri hesaplanmış ve bulgular Grafik 4.1. 'de verilmiştir. Grafik 4.2.'de dört sabit $a$ küre yarıçapı için taban durum enerjisinin $F$ elektrik alan büyüklüğüne bağlı olarak değişimi verilmiştir.




Grafik 4.1. Sonsuz Kuantum kürede dört farklı elektrik alan büyüklüğü için temel durum subband küre yarıçapına göre değişimi.

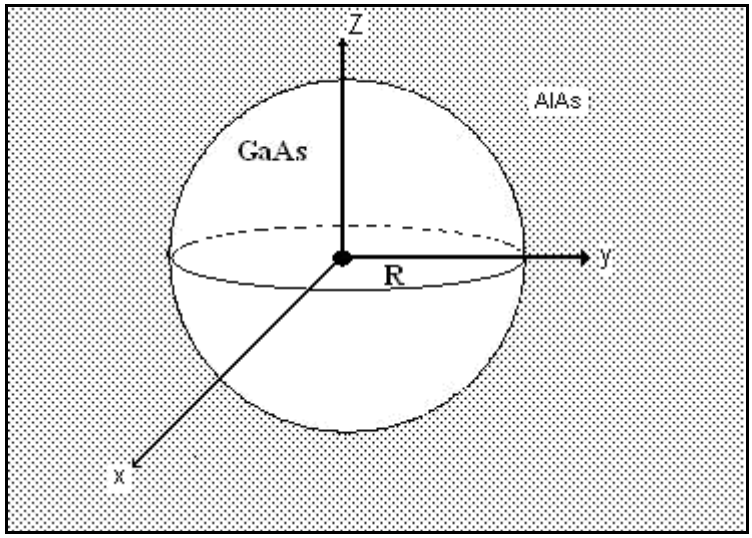



Grafik 4.2. Sonsuz kuantum küresinde temel durum subband enerjisinin dört farklı *a* küre yarıçapı için F elektrik alana göre değişim grafiği

# 5. GaAs/AlAs KÜRESEL KUANTUM NOKTASINDA DONOR YABANCI ATOMU

Donor atomlu kuantum noktaların fiziğini anlamada bağlanma enerjisi çok önemlidir. Donor bağlanma enerjisi sistemin (elektronun) yabancı atomsuz ve yabancı atomlu durumdaki enerji farkı olarak tanımlanır.

## a. Yabancı Atomu Küre Merkezinde




Şekil 5.1.Sonsuz kürede yabancı atom (merkezde)

Küre ve yabancı atom Şekil 5.1. de verilmiştir. Küre merkezine yerleşmiş donor atomu elektronun potansiyel enerjisine katkıda bulunur. Sistemin Hamiltoniyeni, etkin kütle yaklaşımına uygun olarak,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + U(r) \tag{5.1.}$$

olur. Burada

$$U(r) = V(r) - \frac{e^2}{\varepsilon r} \tag{5.2.}$$

ve

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r\langle a \\ \infty & r \geq a \end{cases} \tag{5.3.}$$

$a^*$ , R* birim sisteminde ve $r\langle a$ için yukarıdaki Hamiltoniyen

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{r} \tag{5.4.}$$

olarak yazılır. Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin radyal kısmı, temel durum için,

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{2}{r}\right]\psi(r) = E\psi(r) \tag{5.5.}$$

olur. Bu denklemin analitik çözümü yoktur. Denklem varyasyonel yöntemle çözülecektir. Temel durum için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(r) = N\frac{\sin\frac{\pi}{a}r}{r}e^{-\lambda r} \tag{5.6.}$$

Olur[Bose vd., 1999]. N, normalizasyon katsayı sabitidir. E temel durum enerjisi, herhangi bir $\lambda$ değeri için,

$$E_\lambda = \frac{\langle\psi(r)|H|\psi(r)\rangle}{\langle\psi(r)|\psi(r)\rangle} \tag{5.7.}$$

$$= \frac{\int_0^a \psi^*\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\right) - \frac{2}{r}\right]\psi r^2 dr}{\int_0^a \psi^*\psi r^2 dr} \tag{5.8.}$$

ve $E$ taban durum enerjisi

$$E = \min_\lambda E_\lambda \tag{5.9.}$$

olur. Bu çalışmada integral ve minimizasyon işlemleri nümerik olarak bilgisayarda hesaplanmıştır.

$E_b$ donor bağlanma enerjisi,

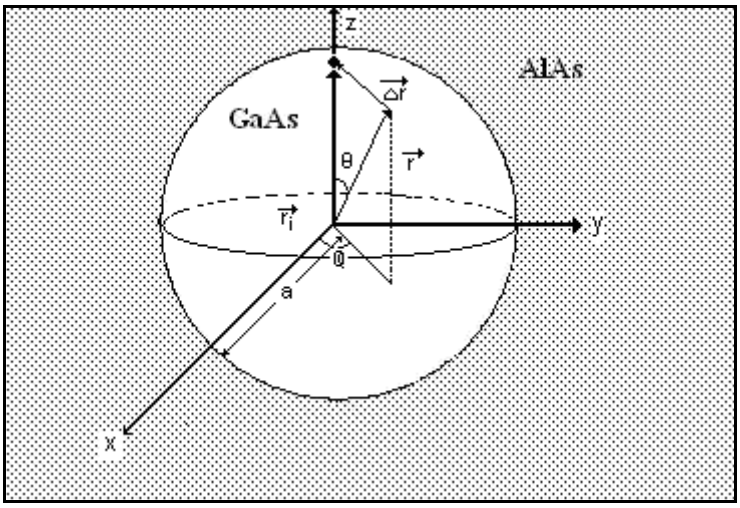
$E_b$ = yabancı atomsuz sistemin enerjisi - yabancı atomlu sistemin enerjisi

veya

$$E_b = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - \min_{\lambda} E_{\lambda} \qquad (5.10.)$$

olur [Mikhail, 2007]. 0,6 - 1,5 a* kuantum küre yarıçap aralığında a* ve R* birim sisteminde, denklem (5.10.) kullanarak bilgisayarda $E_b$ enerjileri nümerik olarak hesaplandı ve $E_b$ bağlanma enerjisinin $a$ kuantum küre yarıçapına göre değişim grafiği, Grafik 5.1.' deki gibi bulundu.

**b. Yabancı Atom Küre Merkezi Dışında (AlAs) :**




Şekil 5.2. Merkez dışında, $0\langle r_i \langle a$, yabancı atomlu kuantum küre noktası

Küre ve yabancı atom Şekil 5.2 de verilmiştir. Yabancı atomun küre merkezinin dışında ve GaAs bölgesi içinde olması, yabancı atom probleminin çözümünü merkezdeki yabancı atom problemine göre zorlaştırır.

Bu çalışmada yabancı atomun konumu $x_i = y_i = 0$ ve $z_i \in [0, a]$ olacak şekilde seçilmiştir. Buna göre, $\Delta\vec{r}$ elektron-donor mesafesi , $\vec{r}$ elektronun ve $\vec{r_i}$ yabancı atomun konum vektörü olmak üzere:

$$\vec{r} + \Delta\vec{r} - \vec{r_i} = 0 \tag{5.11.}$$

veya

$$\left|\Delta\vec{r}\right| = \left|\vec{r_i} - \vec{r}\right| \tag{5.12.}$$

veya

$$\left|\Delta\vec{r}\right| = \left|\vec{r_i} - \vec{r}\right| = \sqrt{r^2 + r_i^2 - 2rr_i\cos\theta} \tag{5.13.}$$

olur. Burada $\cos\left(\vec{r_i}, \vec{r}\right) = \cos\theta$ yani $\theta$ açısı küresel koordinatlardaki kutup (uzay) açısıdır.

$a^*$ ve R* birim sisteminde ve $r\langle a$ için sistemimiz için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi :

$$-\left\{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)-\frac{2}{\sqrt{r^2+r_i^2-2rr_i\cos\theta}}\right\}\psi=E\psi \qquad (5.14.)$$

olur. Denklemin analitik çözümü yoktur. Denklem yaklaşık çözümlerden varyasyonel çözüm yöntemi kullanılarak çözülecektir. Temel durum için dalga fonksiyonu,

$$\psi(r,\theta)=N\frac{\sin\frac{\pi}{a}r}{r}e^{-\lambda\sqrt{r^2+r_i^2-2rr_i\cos\theta}} \qquad (5.15.)$$

olur. N normalizasyon katsayı sabitidir. E temel durum enerjisi , herhangi bir $\lambda$ değeri için

$$E_\lambda=\frac{\langle\psi(r,\theta)|H|\psi(r,\theta)\rangle}{\langle\psi(r,\theta)|\psi(r,\theta)\rangle} \qquad (5.16.)$$

$$=\frac{\int_{r=0}^{a}\int_{\theta=0}^{\pi}r^2\sin\theta dr d\theta\psi^*(r,\theta)H\psi(r,\theta)}{\int_{r=0}^{a}\int_{\theta=0}^{\pi}r^2\sin\theta dr d\theta\psi^*(r,\theta)\psi(r,\theta)} \qquad (5.17.)$$

ve $E$ taban durum enerjisi

$$E=\min_\lambda E_\lambda \qquad (5.18.)$$

olur. Bu durumda, yabancı atom küre merkezi dışında, $E_b$ donor bağlanma enerjisi

$$E_b=\left(\frac{\pi}{a}\right)^2-\min_\lambda E_\lambda \qquad (5.19.)$$

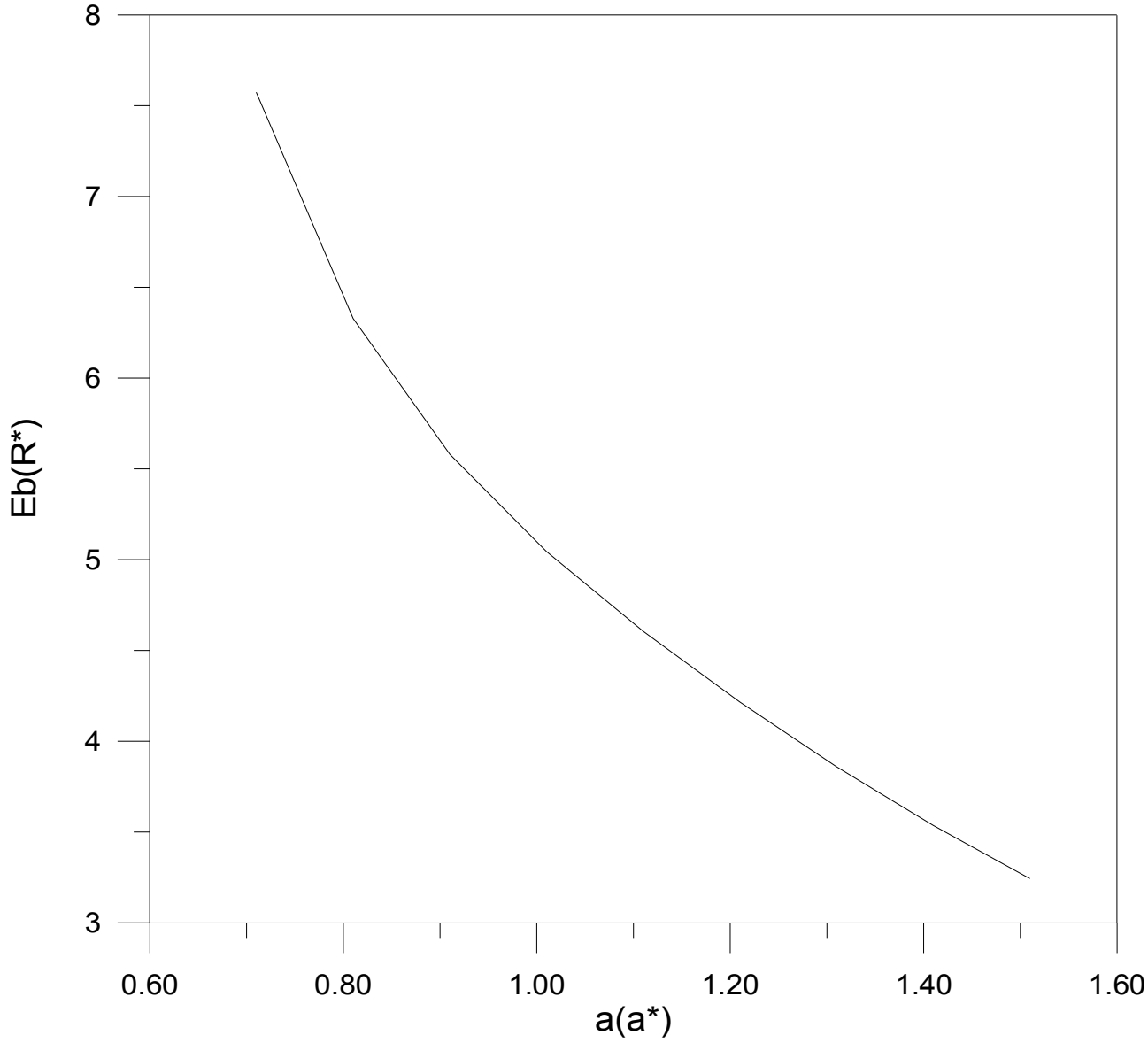
olur. 0,2-2a* kuantum küre yarıçap aralığında, $a^*$ ve R* birim sisteminde, denklem (5.19.) kullanarak, $E_b$ bağlanma enerjisinin $a$ küre yarıçapına bağlı değişimi dört farklı yabancı atom konumu için, Grafik (5.2.) de verilmiştir.

Donor atomlu kuantum noktalarının fiziğini anlamada durum yoğunluğu da önemli bir parametredir. Küre kuantum noktası için durum yoğunluğu :

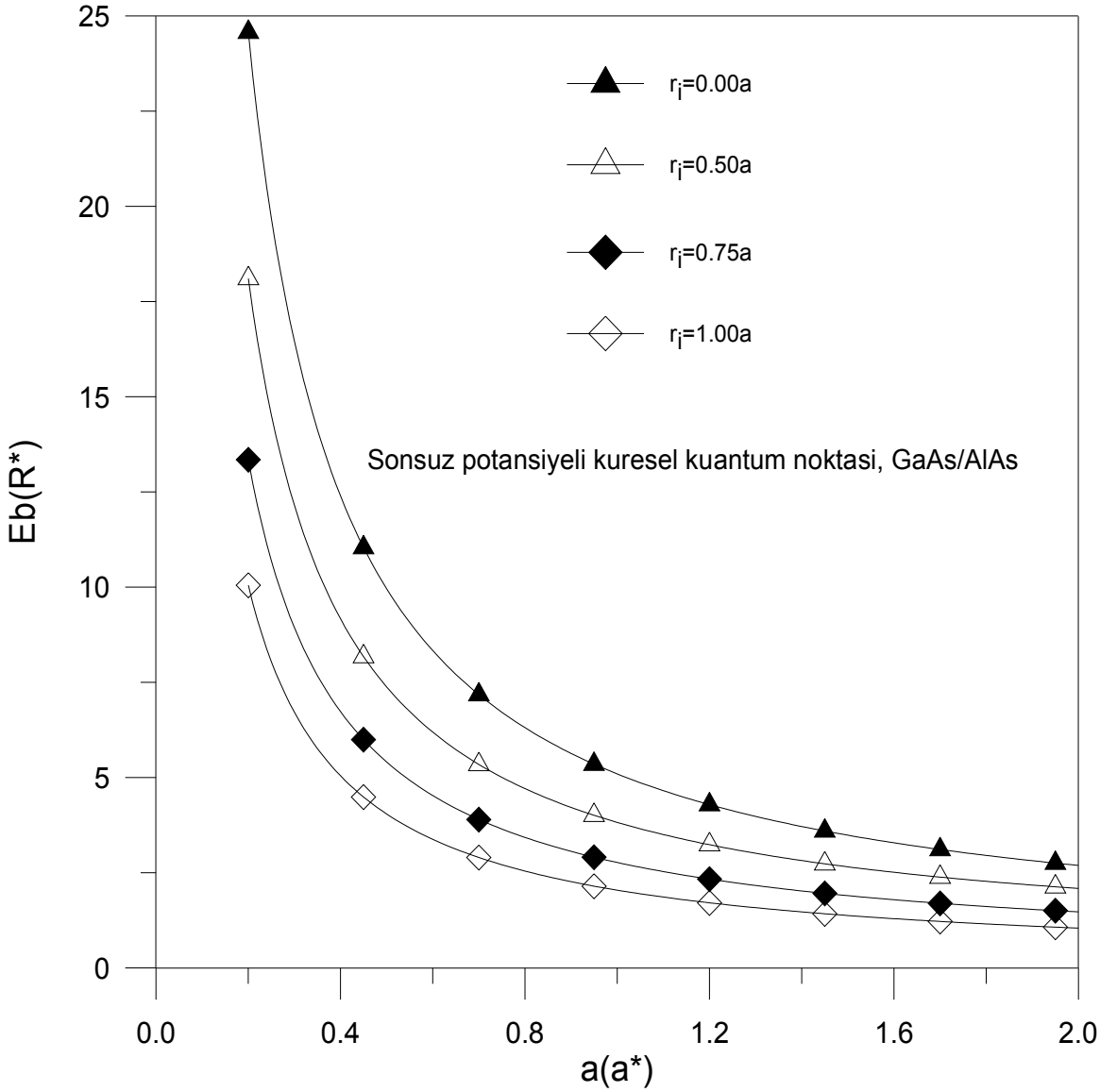
$$g\left(E_b\right) = \frac{3r_i}{a^3}\frac{1}{\frac{dE_b}{dr_i}} \tag{5.20}$$

olarak tanımlanmıştır [ Montenegro vd.,1993].Bu bağıntıdan durum yoğunluğunun bağlanma enerjisinin yabancı atom konumuna göre birinci türevinin tersi ile orantılı olduğu görülmektedir. Başka bir deyimle;

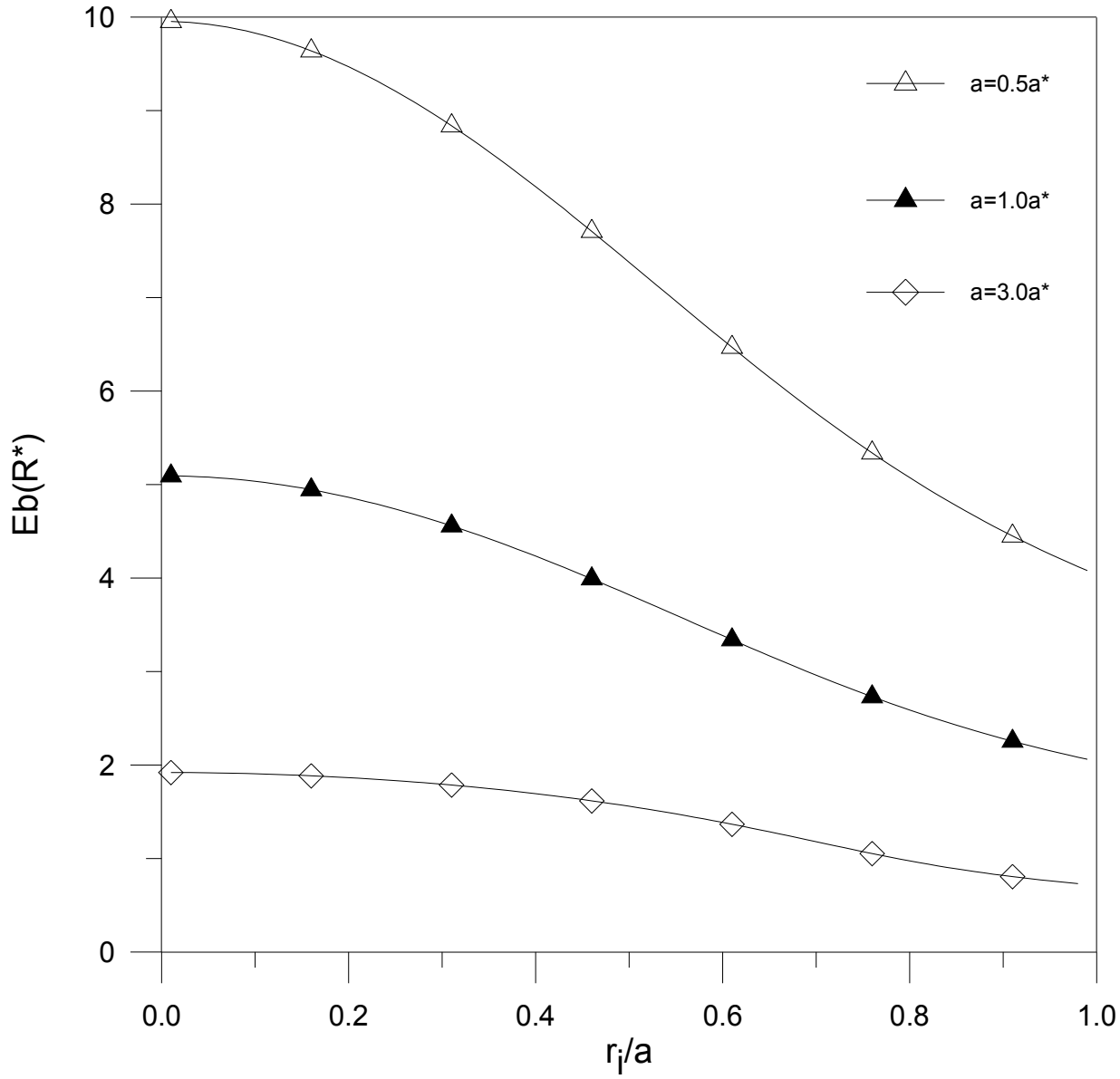
$E_b$ donor bağlanma enerjisinin $r_i$ yabancı atom konumuna göre değişim grafiği donorlu kuantum kuyularını tanımada önemlidir. Bu nedenden dolayı $E_b$ bağlanma enerjisinin $r_i$ donor yabancı atomuna göre değişim grafiği üç farklı $a$ kuantum küre yarıçapı için hesaplanmış ve Grafik 5.3. de verilmiştir.




Grafik 5.1. Sonsuz kürede yabancı atom merkezde iken bağlanma enerjisinin küre yarıçapına göre değişimi




Grafik 5.2. Bağlanma enerjisinin $a$ küre yarıçapına bağlı olarak değişimi




Grafik 5.3. Bağlanma enerjisinin yabancı atom konumuna bağlı olarak değişimi

## 6.SONSUZ POTANSİYEL ENGELİ GaAs/AlAs KÜRE KUANTUM NOKTASINDA DÜZGÜN SABİT ELEKTRİK ALANIN BAĞLANMA ENERJİSİNE ETKİSİ

Kuantum noktalarının anlaşılmasında en önemli olaylardan biri Stark olayıdır. [Esqueda vd., 2005, Vazquez vd., 2006]. Stark olayı özet olarak elektrik alanla enerjinin değişmesidir. Bu nedenle bağlanma enerjisinin elektrik alanla değişimi önemlidir. Bu nedenden dolayı bağlanma enerjisinin elektrik alanla değişimini bulmak anlamlı olacaktır.

$\vec{F}$ elektrik alanı $z$ ekseni doğrultusunda seçilmiştir. Çalışmanın bu kısmında böyle bir elektrik alanın yalnız küre merkezine yerleşmiş bir donor için $E_b$ bağlanma enerjisini nasıl etkilediğini araştırmak olacaktır. Daha önce $E_b$ bağlanma enerjisi iki enerji farkı olarak

$$E_b = \left\{ \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right\}_{F=0} \tag{6.1.}$$

tanımlanmıştı. $\vec{F}$ elektrik alanı her iki enerjisi, $\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ subbant enerjisini ve elektronun yabancı atom varlığındaki enerjisini etkileyecektir. Önce subbant enerjisinin , $\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ 'nin elektrik alandan nasıl etkilendiğini bu çalışmada daha önce göstermiştik.

Küre merkezine yerleşmiş yabancı atomlu ve elektrik alanlı sonsuz kuantum küre sisteminin $E$ enerjisi ( $a^*$ ,R* birim sisteminde )

$$\left(-\nabla^2_{(r,\theta)} - \frac{2}{r} + \eta r\cos\theta\right)\psi(r,\theta) = E_F\psi(r,\theta) \tag{6.2.}$$

veya

$$H\psi(r,\theta) = E_F\psi(r,\theta) \tag{6.3.}$$

zamandan bağımsız Schrödinger denkleminden bulunacaktır. Bu denklemin çözümü varyasyonel yöntemle yaklaşık olarak çözülecektir. Temel durum için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(r,\theta) = N\frac{\sin\left(\frac{\pi}{a}r\right)}{r}e^{-\beta r\cos\theta}e^{-\lambda r} \tag{6.4.}$$

olarak seçilmiştir. Burada $\beta$ ve $\lambda$ varyasyonel parametrelerdir. N normalizasyon katsayı sabitidir. $E_F$ temel durum donor enerjisi, herhangi bir $\lambda$ ve $\beta$ farklı değerleri için

$$E_{F\lambda\beta} = \frac{\langle\psi(r,\theta)|H|\psi(r,\theta)\rangle}{\langle\psi(r,\theta)|\psi(r,\theta)\rangle} \tag{6.5.}$$

olur. Burada

$$H = -\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) - \frac{2}{r} + \eta r\cos\theta \tag{6.6.}$$

ve

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int_{r=0}^{a}\int_{\theta=0}^{\pi} r^2\sin\theta dr d\theta\psi^*(r,\theta)H\psi(r,\theta) \tag{6.7.}$$

ve

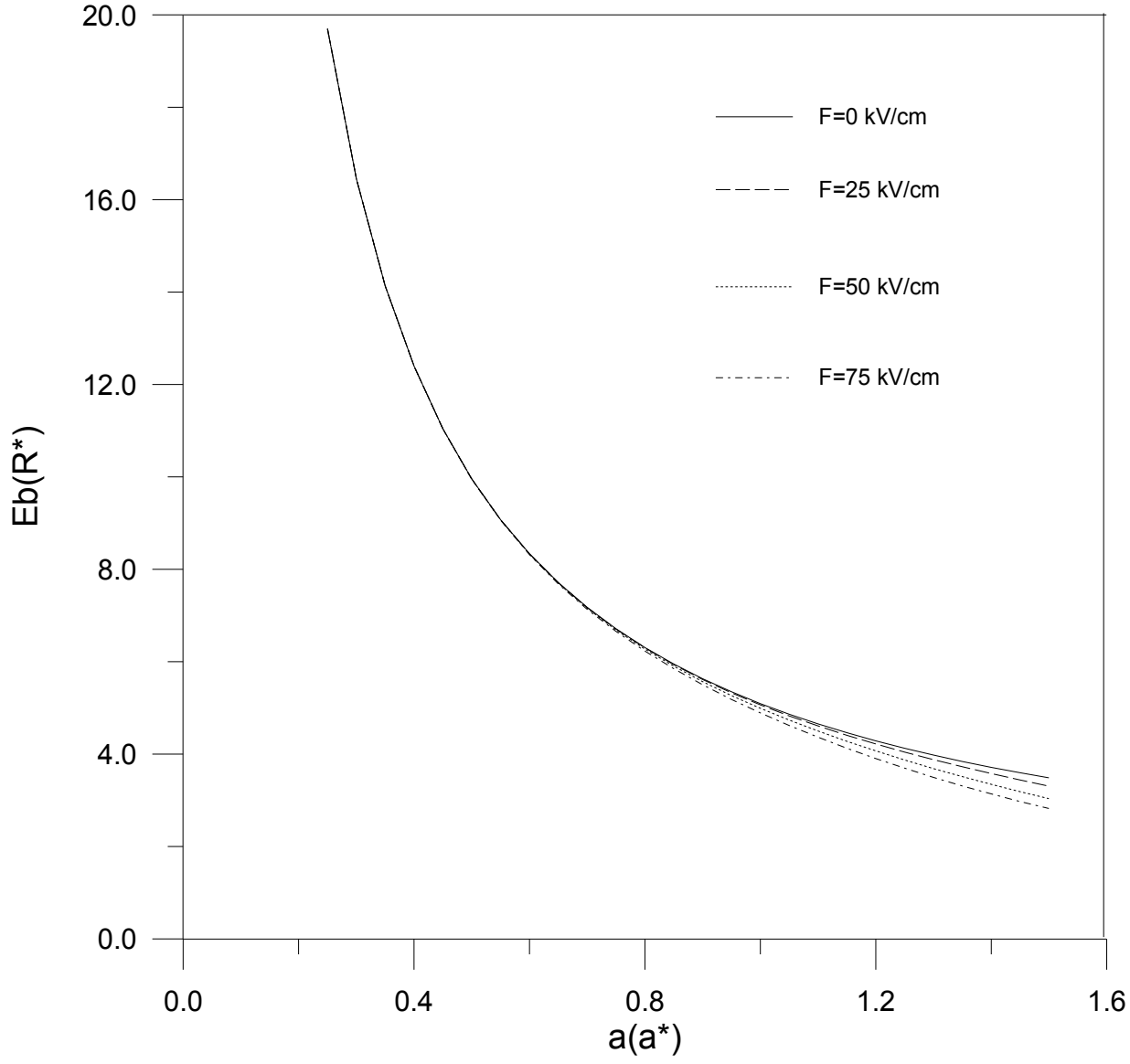
$$E_F = \min_{\lambda,\beta} E_{F\lambda\beta} \tag{6.8.}$$

olur. Hesaplarda $\lambda$ ve $\beta$'ya göre yani çift parametreli varyasyon işlemi, Fortran programı ile yapılmıştır.

$\vec{F} \neq 0$ ve $r_i = 0$ için bağlanma enerjisi

$$E_b = E_0(F) - E_F \tag{6.9.}$$

bağıntısı kullanılarak hesaplanmıştır. Burada $\vec{F} \neq 0$ için $E_0(F)$ temel durum subband enerjisini ifade etmektedir. (6.9.) denklemini kullanarak, merkezde yerleşmiş donor için ve dört farklı elektrik alan değeri için bağlanma enerjisinin $a$ kuantum küre yarıçapına bağlı olarak değişim grafiği Grafik (6.1.) 'de verilmiştir.




Grafik 6.1. Yabancı atomun bağlanma enerjisinin farklı elektrik alanlara göre değişimi

## 7. DONOR ATOMLU SONSUZ POTANSİYEL ENGELİ GaAs/AlAs KUANTUM KÜRESİNDE SICAKLIĞIN BAĞLANMA ENERJİSİNE ETKİSİ

Sistemimizde, sıcaklıkla m* elektron etkin kütlesi, $\varepsilon$ dielektrik sabit ve $a$ kuantum küre yarıçapı sıcaklıkla değişir. Problemin sadeliği ve kolaylığı bakımından $a$ küre yarıçapının sıcaklıkla değişimi ihmal edilebilir büyüklüktedir. Başka bir deyimle bu çalışmada

$$\frac{dm^*}{dT} \neq 0 \quad , \quad \frac{d\varepsilon}{dT} \neq 0 \qquad \text{ve} \qquad \frac{da}{dT} = 0$$

için

$$H_T\psi = E_T\psi \tag{7.1.}$$

Schrödinger denklemi çözülecek ve

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2m^*(T)}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - E_T \tag{7.2.}$$

donor bağlanma enerjisi hesaplanacaktır. $E_T$ enerjisinin hesabında kullanılan Schrödinger denklemi

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \neq 1 \tag{7.3.}$$

birim sisteminde ve $r\langle a$ için yazılırsa

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(T)}\nabla^2_{r,\theta} - \frac{e^2}{\varepsilon(T)}\frac{1}{\left|\vec{r}-\vec{r_i}\right|}\right]\psi(r,\theta) = E_T\psi(r,\theta) \qquad (7.4.)$$

olur. Burada $\varepsilon$ dielektrik sabitinin ($T \leq 200$ K) ve elektron etkin kütlesinin sıcaklığa bağlılıkları sırası ile

$$\varepsilon(T) = (12,74)\exp\left[9,4.10^{-5}(T-75,6)\right] \qquad (7.5.)$$

ve

$$m^*(T) = \frac{m_0}{1 + E^{\Gamma}\left(\frac{2}{E_g^{\Gamma}} + \frac{1}{E_g^{\Gamma}(T) + \Delta_0}\right)} \qquad (7.6.)$$

olarak alınmıştır. $m^*(T)$' nin tanımda

$$E^{\Gamma} = 7,51eV$$

ve

$$\Delta_0 = 0,341eV$$

ve

$$E_g^{\Gamma}(T) = 1,519 - \frac{5,405.10^{-4}T^2}{T + 204} \qquad (7.7.)$$

Olup[Peter vd., 2007] , $E_g^{\Gamma}(T)$' nin birimi $meV$ ve $T$' nin birimi K olarak seçilmektedir. Denklem (7.4.)' ün çözümü varyasyonel yöntemle çözülecektir. Temel durum için deneme dalga fonksiyonu

$$\psi(r,\theta) = N\frac{\sin\frac{\pi}{a}r}{r}e^{-\lambda\sqrt{r^2+r_i^2-2rr_i\cos\theta}} \qquad (7.8.)$$

olarak seçilmiştir. Burada $\lambda$ varyasyonel parametredir. $E_T$ temel durum donor enerjisi, herhangi bir $\lambda$ değeri için

$$E_{T\lambda} = \frac{\langle \Psi(r,\theta) | H | \Psi(r,\theta) \rangle}{\langle \Psi(r,\theta) | \Psi(r,\theta) \rangle} \tag{7.9.}$$

olur. Burada

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2_{r,\theta} - \frac{e^2}{\varepsilon(T)}\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r_i}|} \tag{7.10.}$$

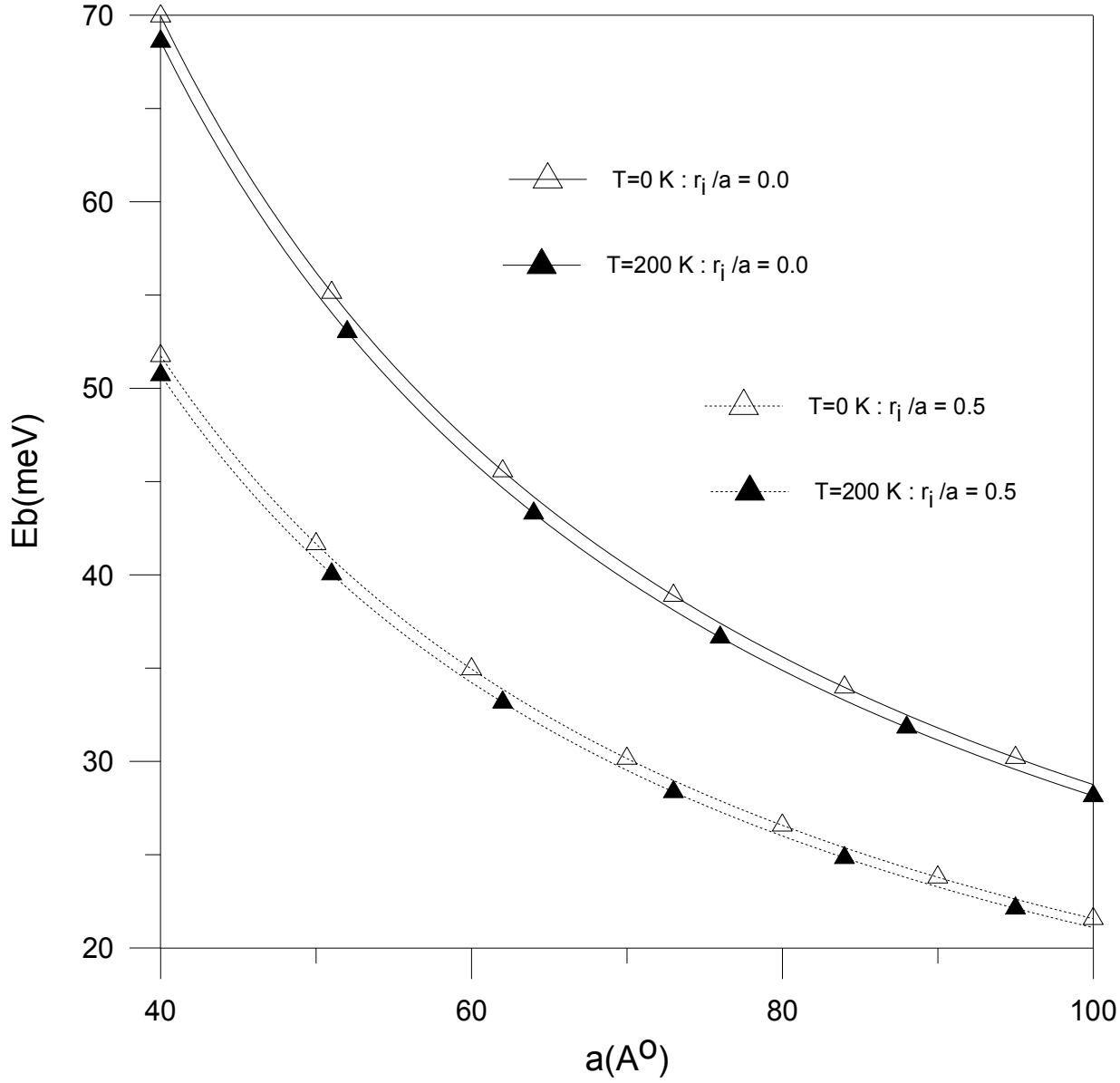
dir. $E_F$ enerjisi

$$E_F = \min_{\lambda} E_{T\lambda} \tag{7.11.}$$

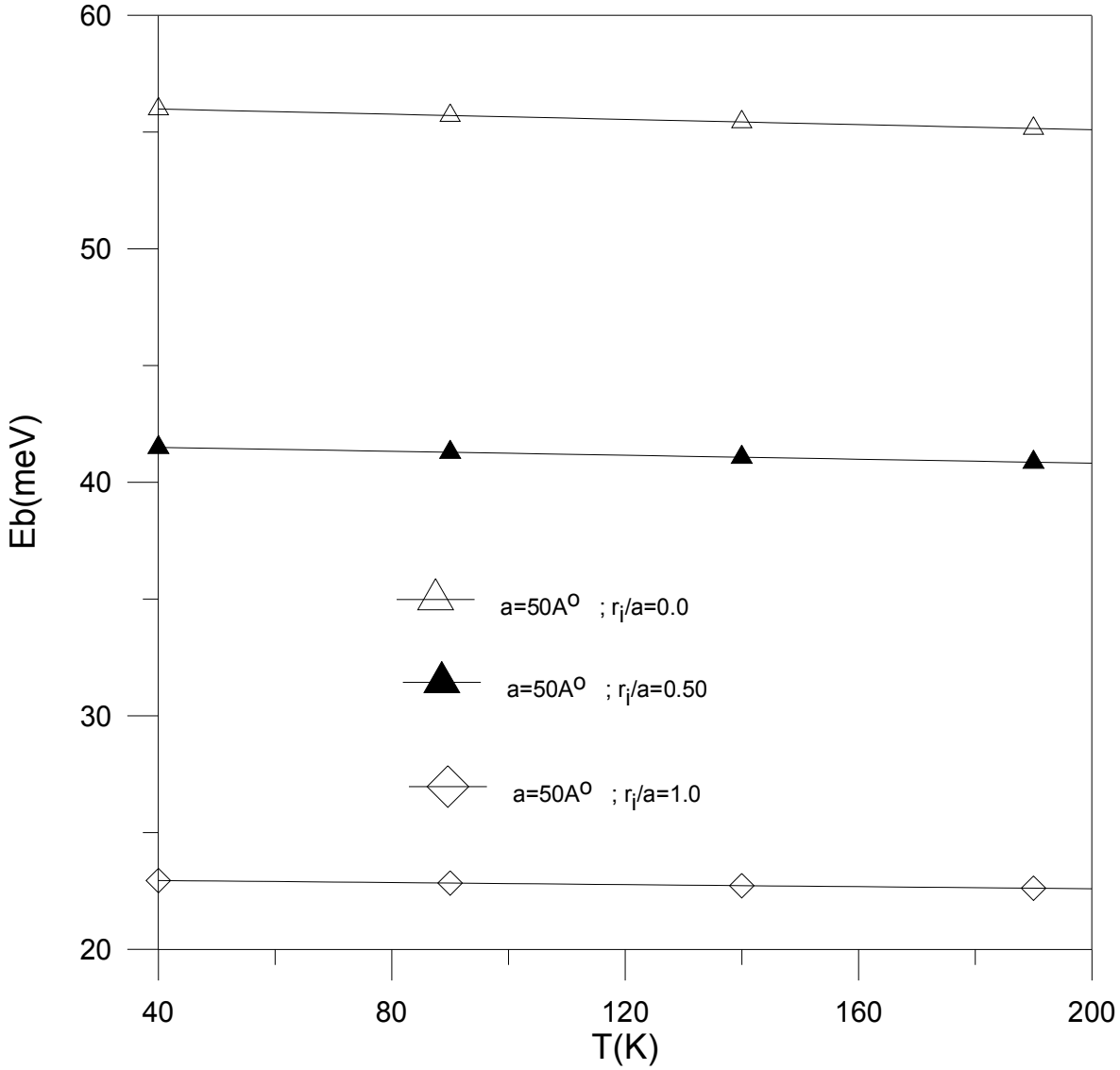
bağıntısından ve $E_b$ enerjisi de

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2m^*(T)}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - E_F \tag{7.12.}$$

bağıntısından bilgisayar yardımı ile hesaplanmıştır. $E_b$ bağlanma enerjisinin $a$ $\left(A^o\right)$ küre yarıçapına bağlı olarak değişim grafiği iki farklı sıcaklık ve iki farklı yabancı atom konumu için hesaplanmış ve sonuçlar Grafik 7.1.olarak verilmiştir. Ayrıca $E_b$ bağlanma enerjisinin $T(K)$ sıcaklığına bağlı olarak değişim grafiği $a = 50$ $A^o$ yarıçapı ve dört farklı yabancı atom konumları ($r_i / a$ =0.0 , 0.5 ,1.0) için Grafik 7.2' de verilmiştir.




Grafik 7.1. Bağlanma enerjisinin iki farklı yabancı atom konumu ve iki farklı Sıcaklık için küre yarıçapına bağlı olarak değişimi




Grafik 7.2. Bağlanma enerjisinin sıcaklıkla değişim grafiği

# SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada sonsuz potansiyeli GaAs/AlAs kuantum küresi incelenmiştir. Çalışmanın birinci kısmında, küre içinde hapsedilmiş bir elektronun temel durum enerjisi yani subband enerjisi $a$ küre yarıçapına bağlı olarak hesaplanmıştır. Grafik 4.1.'den görüldüğü gibi enerji artan yarıçapla azalmaktadır. Sisteme düzgün elektrik alan uygulanmış ve subband enerjisini artan elektrik alanla azaldığı görülmüştür. Grafik 4.1. sonuç literatürü ile uyumludur.[Dane vd.,2008]

Çalışmanın ikinci kısmında sisteme yabancı atom katılmıştır. Bağlanma enerjisinin yabancı atomun merkezden uzaklaşması ile azaldığı gözlenmiştir. Grafik 5.1,Grafik 5.2. ve Grafik 5.3.sonuç literatürle uyumludur[Wu vd.,2008, Porras vd., 1993]. Küre merkezinde yabancı atomu olan sistem düzgün dış elektrik alan içinde konulmuş ve elektrik alanın bağlanma enerjisine etkisi araştırılmıştır. Artan elektrik alanın takriben $a\langle 0.6 \quad a^*$ bölgesinde etkili olmadığı ve $a\rangle 0.6 \quad a^*$ bölgesinde bağlanma enerjisini azalttığı bulunmuştur. Sonuç literatür ile uyumludur. [ Elabsy,A.M.,1992].

Son olarak yabancı atomlu elektrik alansız sistemin sıcaklığı arttırılmış ve sistemdeki değişim donor bağlanma enerjisindeki değişim olarak verilmiştir. Grafik 7.1. ve Grafik 7.2. 'den görüldüğü gibi artan sıcaklık bağlanma enerjisini azaltmaktadır. Sonuç literatürle uyum içindedir[ Elabsy,A.M.,1998 ].

## KAYNAKLAR


1. **BOSE C.,SARKAR C.K.**,1999,"Binding energy of Impurity States in Spherical GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ Quantum Dots",phys.stat.sol.(b)218,461.
2. **DANE C.**,**AKBAŞ H.,MİNEZ S.,GULEROGLU A.**,2008,"Electric field effect in a GaAs/AlAs spherical quantum dot",Physica E.
3. **ELABSY,A.M.**,1992,"Temperature Dependence of Shallow Donor States in GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ Composiyional Superlattice",Physica Scripta.Vol 46,473-475.
4. **ELABSY,A.M.**,1998,"Effect of Temperature on the Binding Energy of a Confined Impurity to a Spherical Semiconductor Quantum Dot",Physica Scripta Vol.59,328-330.
5. **ESQUEDA J.A.R.,MENDOZA C.I.,MUSSOT M.D.C.,VAZQUEZ G.J.**,2005,"Stark effect in a wedge-shaped quantum box",Physica E 28 (2005) 365-373..
6. **KARAOGLU B.**,1994,"Kuantum Mekaniğine Giriş",Bilgitek yayıncılık,İstanbul.
7. **MİKHAİL F.I.,ISMAİL M.M.**,2007,"Binding energy of an off-centre hydrogenic donor impurity in a spherical quantum dot", Phys.Stat.Sol.(b)244,No.16, 3647-3659.
8. **MONTENEGRO P.N,PEREZ-MERCHANCANO PEREZ S.T.**,1993,"Binding energies and density of İmpurity States in spherical GaAs-(Ga,Al)As quantum dots.",J.Appl.Phys.74 (12).
9. **MONTENEGRO N.P.,MERCHANCANO S.T.P.**,1993,"Binding energies and density of impurity States in spherical GaAs-(Ga,Al)As quantum dots",J.Appl.Phys.74 (12).
10. **PARADES-GUTİERREZ H., CUERO –YEPEZ J.C.,and PORRAS-MONTENEGRO N.,1994,"**Effect of spatially dependent screening on the binding energy of shallow impurities GaAs-(Ga,Al)As quantum dots, J.Appl.Phys.75 (10).
11. **PEREZ –MERCHANCANO S.T.,FRANCO R.,VALENCİA J.S.**,2007,**"**Impurity States in a spherical GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum dots:Effects of hydrostatic pressure",Mikroelectronics Journal 39 (2008) 383-386.
12. **PETER A.J.,NAVANEETHAKRİSHNAN K.**,2007,"Simultaneous Effects of pressure and temperature on donors in a GaAlAs/GaAs quantum well",Superlattices and mikrostructures 438 (2008) 63-71.

13. **VAZQUEZ G.J.,MUSSOT M.D.C.,MENDOZA C.I.,SPECTOR H.N.,2004,**"Spherical quantum dot under an electric field"Phys.stat.sol.(c)1,No.S1,S54-S57.

14. **VAZQUEZ G.J.,MUSSOT M.D.C.,MONTEMAYOR-ALDRETE J.A.,SPECTOR H.,MENDOZA C.I.**,2006,"Transverse Stark effect of electrons in a hollow semiconducting quantum wire",Physica E.

15. **WU H.,WANG H.,JİANG L.,GONG Q.,FENG S.**,2008,"The electric field effect on binding energy of hydrogenic impurity in zinc-blende GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ spherical quantum dot",Physica B 404(2009)122-126.

# ÖZGEÇMİŞ

1971 yılının Ağustos ayında Edirne'de doğdum. İlk, orta ve lise tahsilimi Edirne'de tamamladıktan sonra,1989 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik bölümüne girdim,1995 yılının Ocak ayında mezun oldum. Aynı yıl Fizik Öğretmenliği'ne başladım. Halen Edirne Anadolu Kız Teknik ve Meslek Lisesi'nde Fizik Öğretmenliği görevime devam etmekteyim.