T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN-EDEBİYAT FAKÜLTESİ

TRANSFER MATRİS YÖNTEMİNİN HETEROYAPILARA UYGULANMASI

Kevser SÖZEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

KONYA-2007

T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN-EDEBİYAT FAKÜLTESİ

TRANSFER MATRİS YÖNTEMİNİN HETEROYAPILARA UYGULANMASI

Kevser SÖZEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 20/09/2007 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği/oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Doç Dr. Haluk ŞAFAK
(Danışman)

Yrd. Doç Dr. Faruk YÜKSEL
(Üye)

Yrd. Doç Dr. Hayrettin KÜÇÜKÇELEBİ
(Üye)

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

TRANSFER MATRİS YÖNTEMİNİN HETEROYAPILARA UYGULANMASI

Kevser SÖZEN

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Haluk ŞAFAK

2007, 62 Sayfa

Jüri: Doç. Dr. Haluk ŞAFAK (Selçuk Ü.)

Yrd. Doç. Dr. Ömer Faruk YÜKSEL

Yrd. Doç. Dr. Hayrettin KÜÇÜKÇELEBİ

Kuantum sınırlandırılmış sistemlerin enerji özdeğerleri ve sınırlandırma biçiminin ilgili sistemlerin temel elektriksel ve optik özellikleri üzerindeki etkisi üzerine hem deneysel hem de teorik açıdan yoğun bir araştırma konusudur.

Bu çalışmada, monoyapıların temel fiziksel ve optik özellikleri, transfer matris metodu ve bu metotta karşılaşılan sorunlar incelenmiştir. Transfer matris tekniğinin uygulanmasına ilişkin çeşitli örnekler verilerek bu yöntemin heteroyapılara nasıl uygulandığı incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Heteroyapılar, Kuantum Kuyu Yapılar, Transfer Matris Yöntemi

ABSTRACT

THESIS FOR MASTER OF SCIENCE

TRANSFER MATRICE METHOD ON HETEROSTRUCTURES

Kevser Sözen

Selcuk University
Graduate School and Natural and Applied Science
Department of Physics

Supervisor: Doç.Dr. Haluk ŞAFAK
2007

Jury
Doç. Dr. Haluk ŞAFAK

A study on the effect of energy eigenvalues of the quantum confined systems and confining method on the principle electrical and optical properties is a suitable research title for either experimental or theoretical view.

In this work, principal electrical and optical properties of nanostructures, transfer matrice method and the difficulties encountered with this method have been studied. The applications of transfer matrice method to heterosutructures have been studies by presenting some examples on it.

Keywords :heterostructure, quantum well structures, transfer matrice methods

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur. Çalışmam süresince bilgi ve tecrübeleri ile bana her konuda yardımcı olan danışmanım Sayın Doç. Dr. Haluk ŞAFAK'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım sırasında hiçbir zaman destek ve teşviklerini esirgemeyen aileme, Selçuk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü elemanlarına ve özellikle Sayın Prof. Dr. Hamdi Şükür KILIÇ'a teşekkür ederim.

Kevser SÖZEN

Konya, 2007

İÇİNDEKİLER

ÖZET i
ABSTRACT ii
ÖNSÖZ iii
İÇİNDEKİLER iv
1. GİRİŞ 1
2. KUANTUM NANOYAPILAR 3
2.1. Mezoskopik Sistemler 7
2.1.1. Temel Özellikleri 7
2.2. Kuantum Heteroyapı Çeşitleri 9
2.2.1. Kuantum Kuyu Yapıları 11
3. TRANSFER MATRİS YÖNTEMİ 15
3.1. Giriş 15
3.2. Transfer Matris Metodu 16
3.3. Transfer Matris Metoduyla Karşılaşılan Sorunlar 20
4. TRANSFER MATRİS TEKNİĞİNİN UYGULANMASINA İLİŞKİN BAZI ÖRNEKLER 22
4.1. Potansiyel Basamağı 22
4.1.1. Basamak Geçiş Tünelleme Olasılığı 25
4.2. Potansiyel Engeli 36
4.2.1. Engelin Geçme (Tünelleme) Olasılığı 40
4.3. Kuantum Kuyu Problemi 43
4.4. Simetrik Çift Engel Durumu 47
4.5. Simetrik Çift Kuyu Durumu 49
4.6. Asimetrik Çift Engel Durumu 52
4.7. Simetrik Üçlü Engel Durumu 54
4.8. Asimetrik Üçlü Engel Durumu 57
5. SONUÇ VE TARTIŞMA 60
6. KAYNAKÇA 61

1. GİRİŞ

Kuantum sınırlandırılmış sistemler üzerindeki ilk teorik çalışmalar aslında çok eskilere dayanır. Teknolojik gelişmelerin sonucu olarak nanometre mertebesindeki farklı kuantum yapıların deneysel olarak gerçekleştirilebilmesi bu konu üzerindeki ilginin hızlı bir şekilde artmasına neden olmuştur. Özellikle son 20 yıldır bu tür nano ölçekli kuantum mekaniksel sistemler gerek ilginç fiziksel özellikleri, gerekse deneysel ve teorik olarak bilim adamlarına geniş bir ufuk açması bakımından büyük bir ilgi toplamıştır. (Kastner, 1993; Chemla, 1993; Reed, 1993; Johnson, 1995; Mc Euen, 1997; Corcoran and Zorpette, 1997; Gammon, 2000; Bukawski and Simmons, 2002).

20. yüzyıl, transistörlerin icadı ve geliştirilmesi ile yarı iletken cihazların gelişimini ve bununla beraber bilgisayar ve iletişim alanında ortaya konulan gelişmelerle, kuantum mekaniğini de kapsayan bilim ve teknolojideki olağanüstü ilerlemelerin yapıldığı bir zaman dilimidir.

Bu yüzyılın başlarında, elektronların hareketi, fotonların davranışı gibi, Newton mekaniğinin yeterli açıklamaları sağlayamadığı ve kuantum mekaniğinin gelişmesine yol açan fiziksel olaylarla karşı karşıya gelindi. Bir kutudaki serbest parçacık problemi, kuantum mekaniğinin ilk günlerinden bu yana oldukça önemli bir gerçeği ortaya koyar. Özellikle serbest ve bağlı parçacık durumlarındaki enerji spektrumları arasındaki farklılığın görülmesini açıklayıcı ve öğretici bir yapıyı ortaya koyar. Fakat daha sonraları, bu problemin sadece öğretici yönü kalmamış bir fiziksel sistemin özelliklerini anlaşılması için, pratik ve yararlı bir model olmuştur. Bu değişim, hızlı gelişen deneysel tekniklerin üretimde kullanılması ve nano ölçekli yarı iletken yapıların araştırılmasından kaynaklanmaktadır. (Jaskoloski, 1996).

1970'li yıllarda süper örgülerde değişik ilgi çekici fiziksel süreçler gözlenmiş ve literatüre geçmiştir. Bunlara örnek olarak rezonans tünelleme (Chang et al., 1974), altband geçiş süreci (Esaki and Chang, 1974; Miller, 1980; Manuel, 1976) verilebilir. Kuantum süper örgüler üzerinde esas ilgi toplayan gelişme kuantum kuyu lazerlerinin gerçekleştirilmesi ile olmuştur (Pinczuk et al., 1979).

İnce film büyütme tekniklerindeki gelişmeler ve özellikle elektron demeti ve X- ışını litografisi gibi hassas malzeme üretim ve analiz tekniklerinin gelişimi çok farklı boyut ve biçimlerde kuantum yapılarının üretilmesine imkan sağlamıştır. Buna örnek olarak tek boyutlu kuantum tel yapıların üretimi verilebilir. (Berggren et al., 1986; Hansen et al., 1987; Smith et al., 1987)

Teorik çalışmalar kapsamında uygulanmış elektrik alan altındaki çoklu kuantum kuyu yapıları transfer matris tekniği ile kullanılarak analiz etmek, yaygın bir şekilde çalışılmakta ve oldukça faydalı çalışmalar ortaya konmaktadır.

Transfer matrisi tekniği geçiş katsayısı ve doluluk olasılığını temel alan geleneksel tekniklere ek olarak yerelleşmiş yarı özdeğerlerinin (quasi – eigenvalues) bulunmasında kullanılmaktadır. Bu teknikle kuantum kuyuları için elektron ve ağır hollerin enerjileri, yani; özdeğerleri ve dalga fonksiyonları hesaplanır. Bu hesaplamalar lineer ve lineer olmayan elektrik alan altındaki heteroyapılarda uygulanabilir. (Sugg, A.R. Leburton, 1991)

Transfer – matris metodu kompleks band yapılarının hesaplanmasında ya da elektronlar için geçiş ve yansıma katsayılarının hesaplamasında uygulama alanı bulan bir metoddur. Örneğin Cu, Fe ve Si'un kompleks band yapılarına bu metot uygulanmıştır. (D. Wortmam, H. Ishida, and s. Blügel, 2002).

2. KUANTUM NANOYAPILAR (HETEROYAPILAR)

Yarıiletken malzeme bilimindeki ilerlemeler ve teknolojideki gelişmeler, çok değişik yapı ve özelliklere sahip kuantum heteroyapıların ortaya çıkmasına imkan sağlamıştır. Bu ilerlemelerin en önemli nedenlerinden birisi, haberleşme ve iletişim teknolojilerinde gözlenen aşırı talep, diğeri ise değişik özel uygulamaların ivme kazandırdığı deneysel ve teorik çalışmalardır. Hafıza ve hesaplama sistemlerine olan yoğun ve sürekli talep, bunun yanı sıra sinyal iletim ve işleme hızlarının yükseltilmesi yönündeki araştırmalar, spesifik ve yeni mikroelektronik ve opto elektronik aygıtların geliştirilmesine zemin hazırlamıştır.

Teknolojik ilerlemeler ile sonuç teknoloji ürünleri, malzeme bilimi, mühendislik ve yeni aygıt tasarımları arasında oldukça yakın bir ilişki söz konusudur. Bunlar ana hatları ile

-Pratikte ihtiyaç duyulan sonuç teknolojiler;

1. Haberleşme ve iletişim teknolojileri,
2. Diğer özel amaçlı (spesifik) uygulamalar,

- Teknik kapasite ve sistemlere olan talepler;

1. Yüksek entegrasyon,
2. Yüksek hız ve düşük güç tüketimi,
3. Elektrik ve optik sinyallerin işlenmesi,

- Aygıt ve aygıt tasarımlarıyla ilgili talepler;

1. Daha küçük boyutlu aygıtlar,
2. Ara bağlantıların en aza indirilmesi ,
3. Etkin bir optik – elektrik dönüşüm işlemi,

- Malzeme ve malzeme işlenmesine ilişkin talepler;

1. Mevcut malzemelerin daha iyi duruma getirilmesi (daha etkin ve verimli kullanım),
2. Yeni üstün özelliklere sahip malzemelerin keşfi ve üretimi,
3. Yapay çok-tabakalı yapıların tasarım ve üretimi,
4. Malzeme üretme ve işleme tekniklerinin geliştirilmesi.

biçiminde verilebilir.

Yakın bir geleceğe kadar mikroelektronik tümüyle Si-temelli bir bilim dalı olarak çalışılmaktaydı. Çünkü bu element, yüksek bir mekanik kararlılığa sahiptir, ısısal iletkenliği yüksektir, bol ve üretimi nisbeten kolay bir malzemedir, yasak enerji aralığı birçok fotovoltaik uygulama için oldukça uygundur, değişik elementlerle alaşım ve katkı yapılarak çok farklı elektronik özelliklere sahip malzemeler üretilebilmektedir, tek kristal, polikristal ve amorf formlarda büyütülebilmektedir. Silisyumun en yaygın kullanıldığı alan elektronikte entegre devre teknolojisidir. Teknolojik ilerlemeler ve değişik yeni heteroyapıların kullanımı bu alandaki gelişmeyi çok belirgin biçimde ortaya koymaktadır.

Yıl	**1995**	**1998**	**2001**	**2004**	**2007**	**2010**
Dram memorileri Çip başına düşen bit sayısı	64 m	256 m	1 g	4 g	16 g	64 g
Bit başına maliyet (milisent)	0,017	0,007	0,003	0,001	0,0005	0,0002
Çip başına maliyet (US $)	11	18	30	40	80	130
Mikro işlemciler cm^2 ye transistör sayısı	4 m	7 m	13 m	35 m	50 m	90 m
Transistör başına maliyet (milisent)	1	0,5	0,2	0,1	0,05	0,02
Güç kaynağı (v)	3,3	2,5	1,8	1,5	1,2	0,9
Minimum aygıt büyüklüğü (Mm)	0,35	0,25	0,18	0,13	0,10	0,07
Elektrik kusur yoğunluğu ($1/m^2$)	240	160	140	120	100	25
Wafer büyüklüğü (inç)	8	8	12	12	16	16

Malzeme bilimi ve teknolojisindeki gelişmeler özellikle son 40 yıldır büyük bir ivme kazanmıştır. Bu gelişmeler ana hatları ile şu şekilde özetlenebilir:

1960 ve 70'li yıllar;

- Moleküler – demet epitaxy yönteminin bulunuşu (MBE),
- Aşırı (ultra) ince tabaka üretimi,
- Süper örgü (süperlattice) üretimi,

- Kalitatif elektron-demet ve x-ışın mikroskobileri,
- Litografik yöntemle mikroyapı üretimi,

1980 ve 90'lı yıllar;

- Metal-organik-buhar-faz epitaksi yönteminin keşfi,
- Metal-organik-moleküler-demet-epitaksi yönteminin keşfi,
- Atomik tabaka hassasiyetinde üretim,
- S –katkılama yönteminin bulunuşu,
- Scanning (tarayıcı) tünelleme mikroskobi,
- Atomik kuvvet (force) mikroskobi,
- Litografi ve nanoyapı üretiminde etching yöntemi,
- Pikosaniye ve femtosaniye spektroskobisinin keşfi

Günümüz mikroelektronik alanında temel amaç minimum aygıt büyüklüğünün elde edilmesi ve en üst düzeyde entegrasyon (değişik devre elemanlarının bir araya toplanması) seviyesine ulaşılmasıdır. Bunun için yüksek nitelikli yapay çok tabakalı yapılara ihtiyaç vardır. En basit çok tabakalı yapı bir tek heteroeklemdir. Bu tip bir heteroeklemin arayüzeyindeki elektronik özellikler değiştirilerek istenilen fiziksel karakteristiklerin daha iyi duruma getirilmesi mümkündür. Örneğin elektronlar arayüzeye yakın çok ince bir tabaka içerisinde sınırlandırılabilir ve safsızlıklardan uzaysal olarak ayrılabilir. Bu şekilde bir sınırlandırma sonucu elektron mobilitesi önemli ölçüde artar. Benzer şekilde iki ve üç boyutlu elektron kanalları, kuantum kuyu veya tel yapılar, kuantum kutu ve noktalar üretilebilir. Bu tip sınırlandırılmış yapılar genel olarak "kuantum yarıiletken heteroyapılar" veya "kuantum nanoyapılar" olarak adlandırılır.

Kuantum heteroyapıların ve ilgili mikroelektronik ve optoelektronik aygıtların gelişim tarihçesi kısaca gözden geçirilirse, son 25-30 yılda ne kadar hızlı bir ilerlemenin olduğu görülebilir.

1970; Çok-tabakalı yapıların ve süper örgülerin ortaya atılışı,

1974; Rezonans-tünelleme etkisinin keşfi ve kuantum kuyu boyutlarında kuantumlanma etkisinin gözlenmesi,

1978; Modülasyon katkılama etkisi,

1979; İnjeksiyon kuantum-kuyu lazerler,

1980; Yüksek elektron mobiliteli transistörler (HEMT),

1981; Kuantum-sınırlandırılmış stark olayı,

1984; Self-elektron-optik-etki aygıtı (SEED) ve sıcak-elektron transistörler (HET)

1986; Kuantum kuyu ve dalga kılavuzları

1987; Kuantum nokta-kontak, süper örgülerde stark-ladder geçişleri ve kuantum tel infrared fotodedektörler,

1989; Yüzey-yayınımlı lazer,

1990; Tek-elektron tünelleme olayı,

1991; Kuantum mikrokaviteler ve II-VI mavi lazerin keşfi,

1994; Kuantum çığ lazer,

1995; Kuantum-kuyu lazer ve GaN mavi lazerin keşfi.

Mükemmel heteroyapılar bulk malzeme ve alaşımlardan çok daha üstün özelliklere sahip olabilirler. Örneğin bu yapılara dayalı olarak geliştirilen aygıtlar yüzlerce gigahertz mertebesindeki yüksek frekanslarda çalışabilmektedirler. Mesela Si/Ge heteroeklem bipolar transistörler 100 GHz frekansta çalışabilmekte olup bu değer, homoeklem Si bipolar transistörlerin çalışma frekansını fazlasıyla aşmaktadır.

Kuantum etkilerinin önem kazandığı küçük ölçekli bölgelere girildiği zaman, geleneksel aygıt çalışma ilkelerinin geçerliliğini yitirmesi temel sorunlardan birisini oluşturur. Örneğin, tek bir çip üzerinde 250 MB'lik bir bilginin depolanması işleminin gerçekleşebilmesi için klasik sınırları aşan yeni boyutların göz önüne alınması ve temel çalışma prensiplerinin yeniden gözden geçirilerek modifiye edilmesi gerekmektedir. Boyutların küçülmesinin bir sonucu olarak ortaya çıkan kuantum etkilerinin yanısıra, bir elektrik sinyalinin iletiminde işin içine giren elektron sayısında da önemli ölçüde azalma gerçekleşmektedir. Örneğin günümüzde üretilmesi başarılan bazı nano-ölçekli cihazlar, tek-elektron iletimine dayalı olarak çalışabilmektedir. Bu tür tek-elektron aygıtları III-V ve Si/Ge heteroeklemler kullanılarak üretilmiştir. Kuantum kutu boyutlarının 100 A^o veya daha aza

indirilmesi sonucu, oda sıcaklığına yakın sıcaklıklarda çalışan tek-elektron aygıtların üretimi mümkün hale gelmiştir.

Sonuç olarak, mikroelektronik alanındaki mevcut çalışmalar ve ortaya atılan proje ve tasarılar, kuantum heteroyapıların çok daha yoğun biçimde kullanımını ve yeni kuantum etkilere dayalı yapıların gerçekleştirilmesini amaçlamaktadır.

2.1. Mezoskopik Sistemler

Doğadaki tüm yapılar boyutlarına göre 3 ana grupta sınıflandırılırlar:

1. Mikroskobik yapılar; boyutları atom ve molekül mertebesinde ($\sim 1\,\text{Å}$) olan yapılar,
2. Makroskobik yapılar; parçacıkların hareketinin istatistiksel olarak tanımlanabilmesine yetecek mertebede boyutlara sahip yapılar,
3. Mezoskopik yapılar; bu iki ölçek arasında yer alan ve boyutları yaklaşık olarak 10-1000 Å arasında değişen yapılardır. Geometrik boyutları koherans uzunluğu mertebesinde olan sistemler mezoskopik sistem olarak adlandırılır.

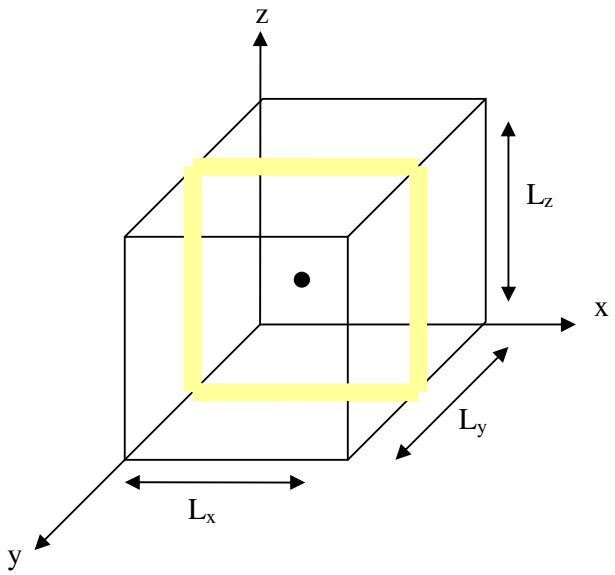
2.1.1. Temel Özellikleri:

Mezoskopik sistemlerde taşıyıcılar, bu yapıya ait öteleme simetrisi bir veya daha fazla uzaysal boyutta bozulmaya uğradığından, 3- boyutta serbestçe hareket etme özelliklerini kaybederler ve belirli bir uzaysal bölge içerisine sınırlandırılırlar. Bulk malzemelerde sürekli olan valans ve iletim bandları bu yapılarda birtakım alt bandlara, hatta kesikli enerji seviyelerine ayrılır. Bir bulk malzemede her k momentum değerine karşılık gelen bir enerji değeri ve durum yoğunluğu söz konusu olduğu halde, mezoskopik yapılarda bu süreklilik bozulur ve ancak belirli (kesikli) enerji değerleri ve süreksiz durum yoğunlukları oluşur.

Mezoskopik yapılar pratikte taşıyıcıların belirli bir uzaysal bölgeye bir potansiyel engeli yardımıyla sınırlandırılması ile oluşturulur. Bu amaçla, bir arka plan (metrix) malzeme içerisine yarı iletken bir mikrokristal yerleştirilir. Metrix ve yarı iletken malzemelerin E_g farklılığından dolayı arayüzeyde bir potansiyel engeli oluşur ve bu engel, yarı iletken içindeki elektron ve deşiklerin bu bölgede sınırlandırılmasına yol açar.

Mezoskopik (nanoyapı) sistemler çok küçük boyutları nedeniyle oldukça sınırlı sayıda parçacık içerirler. Taşıyıcı hareketinin sınırlandırıldığı boyut sayısına bağlı olarak bir nanoyapı 3 ana sınıfta incelenebilir:

1. Kuantum tel,
2. Kuantum kuyu,
3. Kuantum nokta (veya kutu)



Şekil 2-1: 3 boyutlu kübik yapı

L_x ~ L_y >> L_z ise nanoyapı sanki iki boyutludur. Elektron hareketi bir düzlem içerisinde sınırlandırılmıştır ve tek boyutta öteleme simetrisi kırılmıştır. Bu tür yapılar "Kuantum Kuyu" olarak adlandırılır.

L_x ~ L_y << L_z ise nanoyapı sanki tek boyutludur. Taşıyıcı hareketi bir doğrultuda sınırlandırılmış ve öteleme simetrisi iki doğrultuda kırılmıştır. Bu tür yapılar "Kuantum Tel" olarak adlandırılır.

L_x ~ L_y ~ L_z ~ nm ise yapı üç boyutlu veya L boyutu çok küçük olduğundan sanki sıfır boyutludur. Elektron hareketi her üç doğrultuda sınırlandırılmış ve öteleme simetrisi üç boyutta kırılmıştır. Bu tür yapılar "Kuantum Nokta (veya Kutu)" olarak adlandırılır.

Elektron sayısının çok küçük olduğu kuantum noktalarda parçacık hareketi tüm doğrultularda sınırlandırıldığından sürekli bir enerji bandından söz edilemez. Enerji seviyeleri bir atoma benzer biçimde kesiklidir.

2.2. Kuantum Heteroyapı Çeşitleri

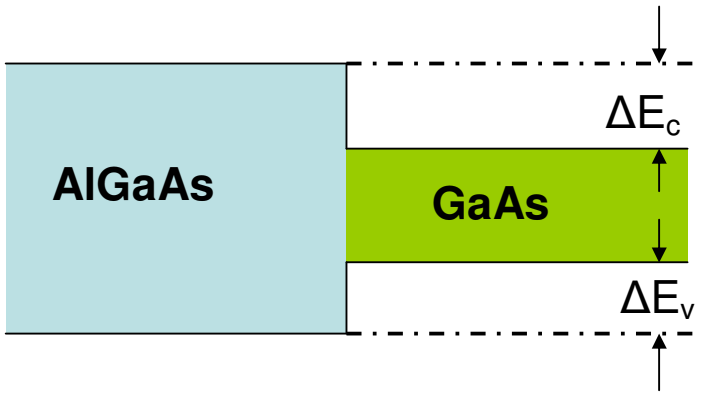
Geleneksel yarıiletken aygıtlar genelde aynı malzemeler arasında eklem oluşturularak üretilmiştir. Örneğin p-n, n^+-n eklemleri gibi. Bu tür aynı malzemeden üretilen eklemler homoeklem olarak adlandırılır. Eğer eklem yapılırken birden fazla farklı malzeme kullanılırsa bu tür eklemlere heteroeklem adı verilir.

Bir heteroeklem iki farklı malzemenin bir eklemde bir araya getirilmesi ile oluşturulur. Modern malzeme üretme teknikleri yardımıyla bu heteroeklemler aşırı biçimde dik (keskin) bir geçiş bölgesine sahip olacak şekilde üretilebilmektedir. En basit heteroyapı iki farklı yarıiletken malzeme arasında gerçekleştirilen bir heteroeklemdir. En iyi bilinen heteroyapılardan birisi SiO_2/Si heteroeklemidir; bu eklemin arayüzeyinde kusur yoğunluğu oldukça düşüktür. Bunun yanında GaAs/AlGaAs, GaInAs/InP, GaInAs/AlInAs, GaSb/AlSb GaN/AlN,InN/GaN sınıfı heteroyapılar ile II-VI bileşiklerinden oluşturulan CdZnSe/ZnSe, ZnSTeSe/ZnSSe heteroyapıları teknolojide yaygın biçimde kullanılmaktadır.

Heteroyapılar (Kuantum Kuyu Yapılar) genelde 2 ana sınıfa ayrılmaktadır.

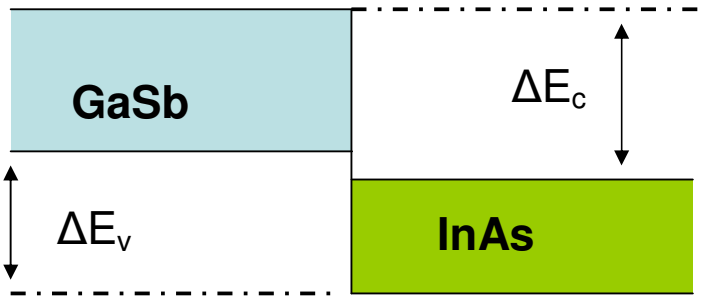
1. Tip Heteroyapılar: En düşük elektron ve deşik durumlarının kuyu malzemesi içerisinde sınırlandırıldığı yapılardır. Örneğin, GaAs/GaAlAs yapılar. Bu tip yapılarda, engel (bariyer) malzemenin enerji band aralığı kuyu malzemeninkinden daha büyüktür ve bu ΔE_g farkı, hem valans banddaki deşikler hem de iletim bandındaki elektronlar için bir (Vc) sınırlandırıcı potansiyel engeli oluşturur.

Kuyu içerisinde neredeyse tek bir atomik tabaka içerisinde ani bir potansiyel düşmesi meydana gelir. Bu ani (dik) potansiyel engeli birçok pratik amaçlar için sonsuz derinlikte kabul edilebilir.



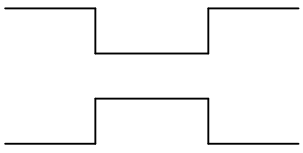
Şekil 2-2: 1. Tip Heteroyapı

2. Tip Heteroyapılar: Elektron ve deşiklerin kuantum kuyunun farklı kısımlarında sınırlandırıldığı yapılardır. Örneğin, GaAs/AlAs gibi yapılarda, deşikler kuyu içinde; elektronlar ise bariyer bölgesinde sınırlandırılır.

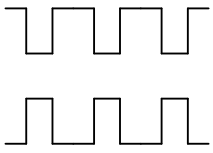


Şekil 2-3: 2. Tip Heteroyapı

Değişik heteroyapı ve kuantum kuyu türleri şu şekilde gösterilebilir.

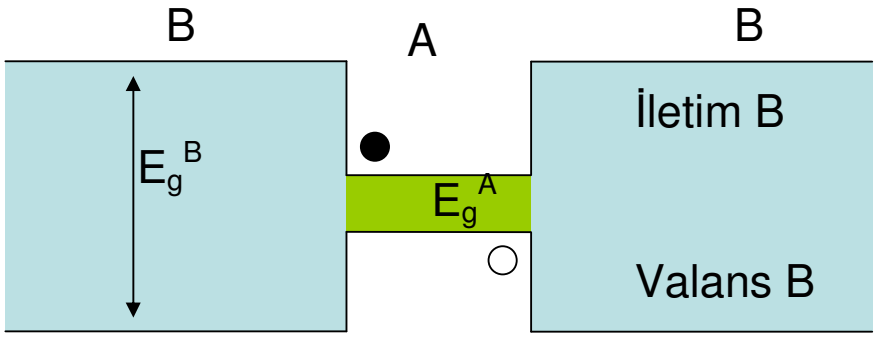


Şekil 2-4: Tek Kuantum Kuyu



Şekil 2-5: Çoklu Kuantum Kuyu

2.2.1. Kuantum Kuyu Yapıları

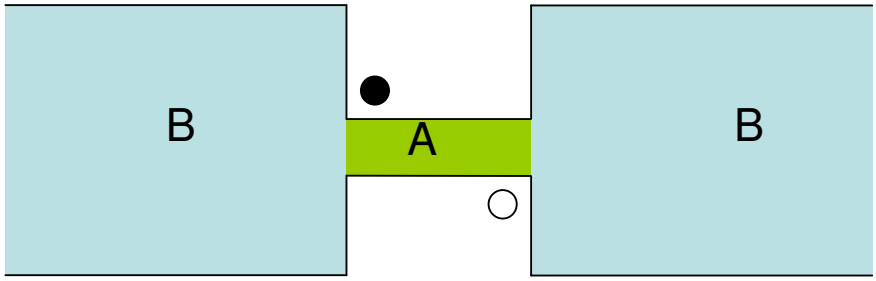


Şekil 2-6: Çift Heteroeklem

Bir A malzemesi, band aralığı kendisinden daha geniş B malzemesinden oluşan iki tabaka arasına yerleştirilirse, bir çift (double) heteroeklem elde edilmiş olur.

$E_g^B > E_g^A$

Tek (Single) Kuantum Kuyu: Eğer A tabakası, kuantum özelliklerinin gözlenebilmesine yetecek kadar ince yapılırsa, bu tip bir yapı, "Tek Kuantum Kuyu" olarak adlandırılır.



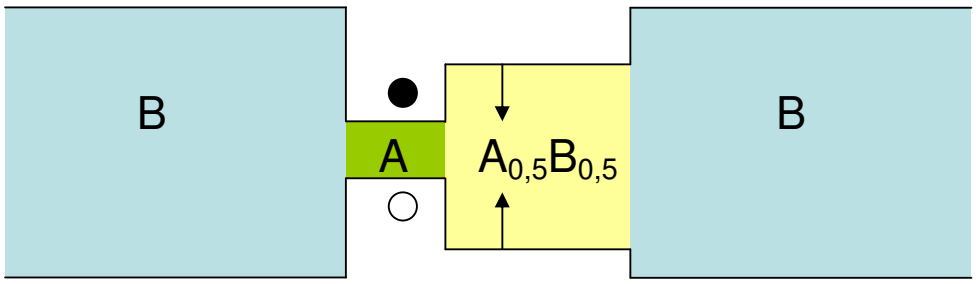
Şekil 2-7: Tek Kuantum Kuyu



Şekil 2-8: Tek Bariyer

Eğer sistemde (ısısal yolla uyarılmış ya da katkılama ve doğal yollarla mevcut) herhangi bir yük taşıyıcısı varsa, bu taşıyıcılar, enerjilerini minimum yapmaya çalışacaktır. Dolayısıyla bu tip bir yapıda, (koyu daire ile gösterilen) elektronlar ve (açık daire ile gösterilen) deşikler kuantum kuyu içerisinde toplanacaktır.

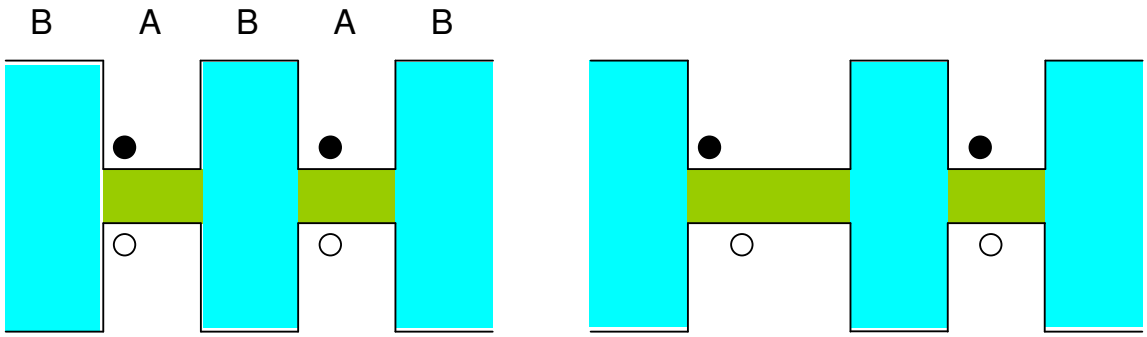
Asimetrik (Basamaklı) Kuantum Kuyu: Bu tip bir heteroyapı içerisine ilave yarıiletken tabakalar yerleştirilebilir. Örneğin A ve B malzemeleri arasına bir alaşım tabakanın yerleştirilmesi ile "Basamaklı (Asimetrik) Kuantum Kuyu" yapılar üretilebilir.



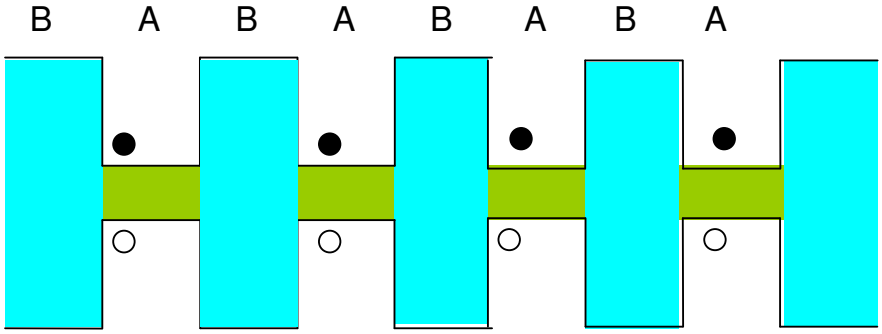
Şekil 2-9: Basamaklı Kuantum kuyu

Şekilde basamaklı kuantum kuyu yapıda, A ile B arasına, A ve B malzemelerinin $A_{0,5}B_{0,5}$ biçiminde bir alaşımından üretilen bir tabaka yerleştirilmiştir.

Çeşitli kuantum kuyu yapılar, ardışık olarak yerleştirilirse "Çift (Double) Kuantum Kuyu" ve "Çoklu (Multiple) Kuantum Kuyu" yapılar üretilebilir.

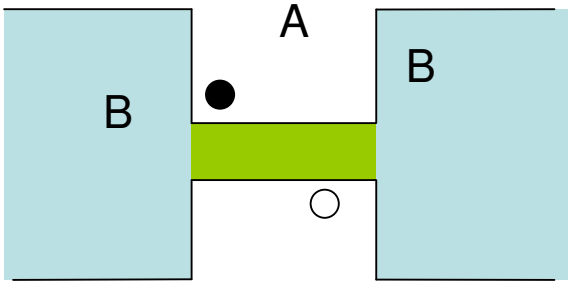


Şekil 2-10: Simetrik Çift Kuantum Kuyu Asimetrik Çift Kuantum Kuyu

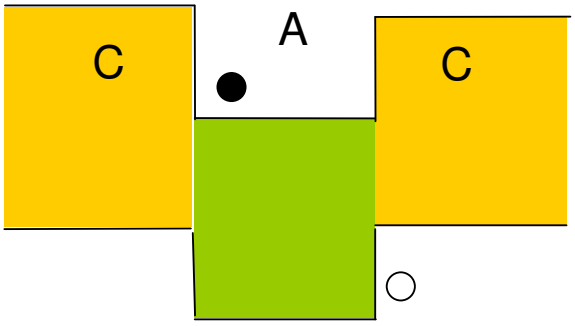


Şekil 2-11: Çoklu Kuantum Kuyu

Süper örgü yapılar ise çok sayıda kuantum kuyu yapının ardışık olarak yerleştirilmesi ile elde edilir. Süper örgü ile çoklu kuantum kuyu yapılar arasındaki en temel fark, kuyu yapılar arasındaki etkileşmenin boyutudur. Çoklu bir kuantum kuyu yapı, yalıtılmış tek kuantum kuyu yapıların bir topluluğu şeklinde davranırken, bir süper örgüde kuantum kuyular etkileşir.



Şekil 2-12: 1. Tip Kuantum Kuyu



Şekil 2-13: 2. Tip Kuantum Kuyu

1. tip yapılarda bir malzemenin (burada A) band aralığı, daha geniş band aralığına sahip bir diğer malzemenin (B) tamamen içerisinde yer alır. Bunun sonucu, elektron ve deşikler, aynı malzemeden oluşan kuantum kuyu yapı içerisinde toplanırlar. Dolayısıyla her iki tip yük taşıyıcısının aynı uzaysal bölgede lokalize olması etkin (hızlı) bir yeniden birleşme sürecine neden olur.

2. tip yapılarda A ve C malzemelerinin band aralıkları o şekilde düzenlenmiştir ki, iletim ve valans bandlarda oluşan kuantum kuyu yapılar, farklı malzemeler içerisinde yer alır. Bu ise, elektron ve deşiklerin yarıiletkenin farklı tabakalarında (örn. elektronların A'da, deşiklerin C'de) sınırlandırılmasına yol açar. Bunun sonucunda, elektron ve deşiklerin yeniden birleşme süreleri oldukça uzar.

3. TRANSFER MATRİS YÖNTEMİ

3.1. GİRİŞ

Heteroyapılarda taşıyıcıların dalga fonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini belirlemek maksadıyla zamandan bağımsız tek boyutlu Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{m^*_z}\frac{d}{dz}\Psi(z)\right)+(E-\varphi(z))\Psi(z)=0 \qquad (3\text{-}1)$$

denkleminin sayısal olarak çözülmesi gerekmektedir. Bunun için kullanılan yöntemler temelde 3 ana sınıfta ele alınabilir. Bunlar;

a. Transfer matris tekniği

b. Doğrudan analitik çözüm yöntemi

c. Sayısal integrasyon metodları

Bu yöntemlerden transfer matris tekniği özellikle belirli ara yüzeylere ve sınır durumlarına sahip kuantum kuyularından enerji öz değerlerinin belirlenmesinde tek başına veya problemin karmaşıklığı ile bağlantılı olarak diğer yöntemlerle birlikte oldukça yaygın biçimde kullanılmaktadır.

Yöntem temelde keskin ara yüzeylere (potansiyel enerji fonksiyonunun keskin biçimde değiştiği noktalara) sahip yapılarda dalga fonksiyonlarının ve türevlerinin ilgili ara yüzeylerde ve sınırlarda sürekliliği şartına dayanır. Bu amaçla incelenen yapı geometrik açıdan potansiyel enerji fonksiyonunda keskin değişimlerin olduğu noktalar temel alınarak belirli bağımsız bölgelere ayrılır. Her bir bölge içerisinde Schrödinger denkleminin özfonksiyonları belirlenir. Bu özfonksiyonların potansiyeli keskin değişikliği olan noktalardaki sürekliliği gözönüne alınarak ilgili noktanın her iki tarafındaki özfonksiyonlar arasında bir matris eşitliği oluşturulur. Aynı işlemin yapıdaki tüm arayüzeylerde gerçekleştirilmesi ile genel bir global matris eşitliğine ulaşılır. Bu global matris eşitliğinin çözümü ise enerji özdeğerlerini verir.

Yöntemin en önemli eksikliği özellikle özdeğer ve özfonksiyonlarda keskin değişimlerin sözkonusu olduğu yapılarda ortaya çıkmaktadır. Yöntemin özelliği

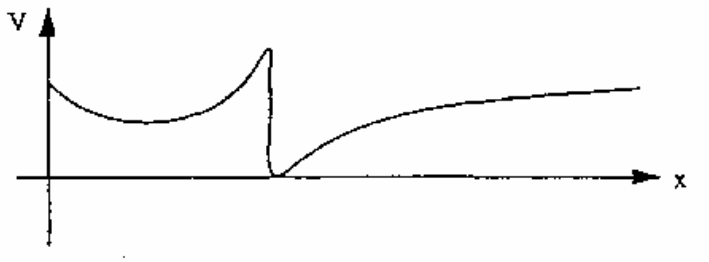
yapının kesikli hale getirilmesi ilkesi üzerine kurulduğundan matris eşitliğinde bir terimin çok küçük diğerinin ise çok büyük olması özellikle matris çarpımları ve özdeğer hesaplamasında sayısal bazı güçlüklere neden olabilir.

Transfer matris tekniği özellikle çoklu kuantum kuyuları ve süper örgülerde enerji özdeğerinin belirlenmesinde keskin arayüzeylerde ve potansiyel engellerinde geçiş ve tünelleme katsayılarının hesaplanmasında başarılı biçimde uygulanmaktadır.

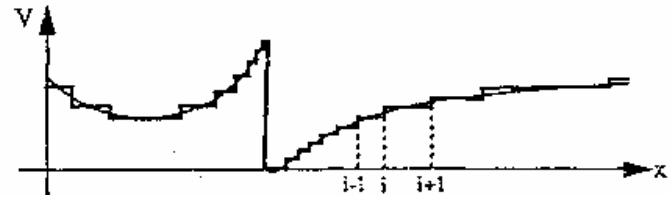
3.2. Transfer Matris Metodu

Transfer matris metodu (3-1) çözümün analitik olarak elde edilebildiği bölgeleri birleştirerek çözer. Çözüm için analitik ifadeyi elde etmek amacıyla potansiyel sabit potansiyel bölgelerine ya da parçalı lineer potansiyel bölgelerine ayrılmalıdır.

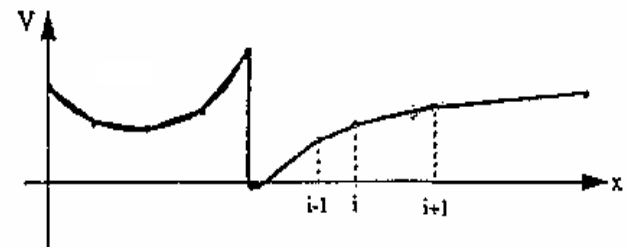
Başlangıç Potansiyel Kesiti



Sabit Potansiyel Yaklaşım



Parçalı Lineer Yaklaşım



Şekil 3-1: Transfer Matris için Ayırım Şeması

Şekil 3-1'de transfer matris metodunun kullandığı potansiyel fonksiyonunun ayırım şemasının temsili görülmektedir. Potansiyel ikinci eğrideki gibi gerçek (doğru) potansiyele potansiyel adımlar dizisiyle ya da üçüncü eğrideki gibi gerçek potansiyele parçalara uygun bir şekilde ayrılabilir.

Her iki durumda da analitik çözümler;

$$\Psi_i(z) = A_i \xi_i(z) + B_i \eta_i(z) \qquad (3\text{-}2)$$

şeklinde elde edilir. $\xi_i(z)$ ve $\eta_i(z)$ (3-1) denklemini sağlayan tam bir ortogonal fonksiyon takımını oluşturmaktadır. A_i ve B_i her bir bölgede belirlenmesi gereken sabitlerdir.

Gerçek potansiyelin sabit potansiyel bölgelerine ayrılmasındaki ilk durumda fonksiyonlar kompleks ve üsteldir (Ando and Itoh, 1987).

$$\xi_i(z) = e^{ik_i z}$$

$$\eta_i(z) = e^{-ik_i z}$$

$$k_i = \sqrt{\frac{2m_i^*(E-\varphi_i)}{\hbar^2}} \qquad (3\text{-}3)$$

Parçalı doğrusal durum için ise fonksiyonlar Airy fonksiyonlarıdır.

$$\xi_i(z) = A_i(z_i)$$

$$\eta_i(z) = B_i(z_i)$$

$$z_i = -\left(\frac{2m_i^* F_i}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(x_i + \left(\frac{\varphi_i - E}{F_i}\right)\right) \qquad (3\text{-}4)$$

φ_i, i'inci aralığın sol ucundaki potansiyeldir. F_i yerel elektrik alandır ve

$$F_i = -\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{x_{i+1} - x_i} \qquad (3\text{-}5)$$

ile verilir. Her bir bölge için analitik çözümler Ψ ve $\frac{1}{m^*_i}\Psi'$'de korunan sınır şartlarına sahip her bir arayüzeyde birleştirilir. Eğer i'inci arayüzeyin sol tarafındaki z koordinatı z_i^l ile ve sağındaki z koordinatı da z_i^r ile gösterilirse sınır şartları matris formunda

$$\begin{bmatrix} \xi_{i-1}(z_i^1) & \eta_{i-1}(z_i^1) \\ \xi'_{i-1}(z_i^1) & \eta'_{i-1}(z_i^1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_i(z_i^r) & \eta_i(z_i^r) \\ \xi'_i(z_i^r) & \eta'_i(z_i^r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} \qquad (3\text{-}6)$$

olarak gösterilebilir.

Bu denklem arayüzeyin sağ yanındaki çözümle sol yanındaki çözümü birleştirir. Eğer bu işlem her bir arayüzey için devam ettirilirse yapının sol tarafındaki $(A_o,B_o)=\bar{C}_o$ katsayılarıyla yapının sağ tarafındaki $(A_n,B_n)=\bar{C}_n$ katsayılarını birleştiren ifade

$$\bar{C}n = M_n^{-1}(z_n^r)\, M_{n-1}(z_n^\ell)\, M_{n-1}^{-1}(z_{n-1}^r) \ldots\ldots M_1^{-1}(z_1^r)\, M_o(z_o^\ell)\, \bar{C}_o \qquad (3\text{-}7)$$

$$M_n(z_i) = \begin{bmatrix} \xi_i(z_i) & \eta_i(z_i) \\ \xi'_i(z_i) & \eta'_i(z_i) \end{bmatrix} \qquad (3\text{-}8)$$

olarak elde edilir.

Tüm yapı üzerinden çözümü hesaplamak için, sınırlardaki katsayılar, çözümü yapının bir kenarından diğer kenarına taşımak için denk. 3-8'de kullanılır.

Enerji özdeğerleri dalga fonksiyonunun $x=\mp\infty$'daki sınır şartları göz önünde bulundurularak elde edilir. Kapalı (sınırlı) durum için parçacığın dalga fonksiyonunun karesi integre edilebilmeli yani $x\rightarrow \mp\infty$ iken $\psi(x)\rightarrow 0$ gitmelidir. Eğer yapı için toplam transfer matrisi aşağıdaki gibi yazılırsa

$$M_T = \begin{bmatrix} m_{11} m_{12} \\ m_{21} m_{22} \end{bmatrix} = \prod_i M^{-1}{}_{i+1}(z_{i+1}^r) M_i(z_i^r) \qquad (3\text{-}9)$$

$\mp\infty$'daki koşulların sağlanması için $m_{22}=0$ olmalıdır. Bu, sınır şartlarının $B_0=0$, $A_n=0$ olması gerektiği göz önünde bulundurularak gözlenebilir. Böylece tüm yapı için toplam transfer matrisi M_T ve dalgafonksiyonunun sınır şartları kullanılarak

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ 0 \end{bmatrix}^T = \begin{pmatrix} m_{11} m_{12} \\ m_{21} m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ B_n \end{pmatrix} \tag{3-10}$$

ifadesi yazılır.

Bu eşitlik tüm B_n değerleri için $m_{22}B_n=0$ olmasını gerektirir. $B_n=0$ önemsiz çözümünü ifade edeceği için $m_{22}=0$'dır.

Böylece sistemin özdeğerlerini belirtmek için $m_{22}(E)=0$ değerleri istenen E bölgesi üzerinde bulunmalıdır. Her bir özdeğere karşılık gelen dalga fonksiyonu her bölgede dalga fonksiyonundaki katsayıların hesaplanmasıyla elde edilir. Böylece bunlar her bölgede analitik çözümde yerine konulur ve dalga fonksiyonu hesaplanır. Uç noktalardaki katsayılar tüm yapı boyunca dalga fonksiyonunun normalize edilmesiyle belirlenebilir. Yapının tünelleme iletim katsayıları her bir bölgede katsayıların genliklerinin oranı göz önünde bulundurularak hesaplanır. Analitik çözüm ileri doğru yayılan dalga ile geri doğru yansıyan dalganın çizgisel süperpozisyonudur. Eğer bunlar, belirli bir arayüzeye gelen bir yansıyan dalga ile belirlenirse arayüzey boyunca tünelleme olasılığı

$$T = \frac{\left|A_{n+1}\right|^2 k_{n+1}}{\left|A_n\right|^2 k_n} \tag{3-11}$$

şeklinde belirlenir. Burada T tünelleme iletim olasılığıdır. A_i ve k_i ise sırasıyla denk (3-2) ve (3-3) ile verilmiştir(Lui and Fukuma, 1986).

Unutulmamalıdır ki lineer interpolasyon şemasında k_i'nin belirlenişi keyfidir. Ama değeri bulunmak istenilen bölgedeki noktaya bağlıdır. Oysa sabit potansiyel yaklaşımında değeri tüm bölge boyunca sabittir. Genellikle tünelleme iletim katsayıları tüm yapı boyunca hesaplanır ve yapının uçlarındaki bölgelerde

sabit kabul edilir. Bu dikkate alınamayan bir yaklaşım değildir(Wiley and Sons, 1981).

3-3 Transfer Matris Metoduyla Karşılaşılan Sorunlar

Transfer matris metoduyla ilgili problemler üstel ve airy fonksiyon metodları için farklılık arzeder. Buna rağmen bazı ortak noktaları vardır. Her iki metotta da öz enerji ve band uçları arasındaki enerji farkı büyük olduğu zaman nümerik zorluklar ortaya çıkar. Bu ise üstel ve airy fonksiyonların analitik çözümlemelerinde bir terim için çok büyükten diğer bir terim için çok küçük olmasına neden olur. Bu doğru olmayan sayısal sonuçlara yol açan matrislerin çarpımlarının hesabında oluşan sayısal hatalara yol açar. Buna nümerik taşma veya katastrofik denir.

Airy fonksiyon çözümü exponansiyel çözümlerden ziyade bu tip problemlerle daha çok ilgilenir. Bunun nedeni ise Airy fonksiyonunun seri açılımındaki büyük argumanlar

$$A_i(z_i), A_i(z_i)' \propto e^{\pm\varsigma} \qquad (3\text{-}12)$$

burada $\varsigma = \frac{2}{3} z_i^{\frac{3}{2}}$

şeklinde olmalıdır. Dolayısıyla bu fonksiyonlar sabit potansiyel yaklaşımındaki üstel argumanlardan daha hızlı değişir. Airy fonksiyonları sadece büyük argumanlar için seri açılımıyla belirlenir. Bu onların kullanımını cazibesiz hale getirir. Çünkü fonksiyonların hesaplanması çok yoğun bir bilgisayar hesaplaması gerektirir. Airy fonksiyon çözümlemelerinde bir bölgedeki elektrik alan küçülmesi (3-4)'deki z argümanının çok büyümesine, küçük enerji saplamaları ve kütleler için bile sayısal istikrarsızlıkların şiddetlenmesine izin verir. Düzenek bölgelerinin sayısı daha büyük olarak bölündüğü için ortaya çıkan sayısal istikrarsızlıkların tehlikesi daha da büyür.

Bu Schrödinger denkleminin doğasından gelmektedir. Schrödinger denklemi "Stiff" denklemi olarak sınıflandırılır. Stiff denklemleri nümerik olarak çözüldüklerinde ortaya çıkan problemler için kullanılır. Transfer matris metodu

Schrödinger denkleminin yeterince iyi çözümlenebildiği durumlarda kullanılmaz. Genel çözümler için yeterlidir.

Bu problem hangi metot olursa olsun farklılaşma süreçleri (şemaları) kulanıldığı her metodun doğasında vardır.

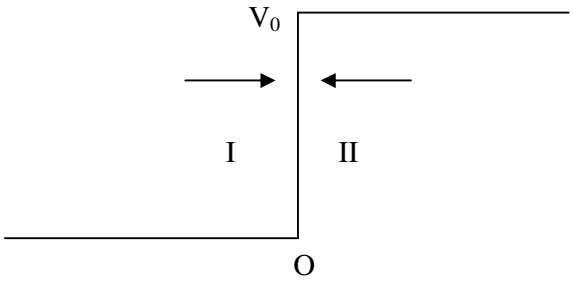
Transfer matris metodunun bir diğer eksikliği farklılaşma sürecidir. Ne sabit potansiyel ne de parçalı doğrusal potansiyel yaklaşımları tam olarak doğru potansiyel profilini göstermezler. Bu ise hesaplanmış sonuçlarda önemli hatalara yol açar (Wilson, Allsopp and Marton, 1994).

Böylece transfer matris metodu potansiyel varyasyonun toplam menzilinin ve etkin kütlenin küçük olduğu küçük ayrıntılı uygulamalarda kullanımı uygundur. Aslında transfer matris metodu oldukça uygun bir metottur ve küçük (~300 $\mathring{A}$ toplam) elektron tünelleme yapılarının çalışılmasında geniş olarak kullanılır.

Bu hesaplamalarda deşikler ihmal edilir ve böylece büyük kütleli terimli problemler ortaya çıkmaz.

4. TRANSFER MATRİS METODU

4.1. Potansiyel Basamağı



Şekil 4-1. V_0 potansiyeline sahip basamak

I. Bölgedeki dalga fonksiyonu Ψ_1 ve II. bölgedeki dalga fonksiyonu Ψ_2 şu şekilde verilir.

$$\Psi_1 = Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \ldots\ldots z < 0$$
$$\Psi_2 = Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \ldots\ldots 0 < z \qquad (4\text{-}1)$$

I. bölgenin dalga vektörü k_1 ve II. bölgenin dalga vektörü k_2,

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V_0 - E)}{\hbar^2}} \qquad (4\text{-}2)$$

şeklindedir. z=0 'da; süreklilik şartına göre;

$$A + B = C + D$$
$$\frac{1}{m_w}(ik_1 A - ik_1 B) = \frac{1}{m_b}(k_2 C - k_2 D) \qquad (4\text{-}3)$$

olur. Denklemleri matris formunda yazarsak;

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_w} & -\frac{ik_1}{m_w} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_w} & -\frac{ik_1}{m_w} \end{pmatrix} \quad ; \quad m_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix}$$

$$m_1\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_2\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}4)$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1}m_2\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

buluruz. Şimdi, m_1 'in tersini bulalım:

$m_1^{-1} = \frac{Adjm_1}{\det m_1}$ olarak hesaplanır. Burada, öncelikle det m_1 ve Adj(m_1)'i bulmalıyız.

m_1 matrisinin determinantı;

$$m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_w} & -\frac{ik_1}{m_w} \end{pmatrix} \; ; \quad \det m_1 = (-\frac{ik_1}{m_w}) - (\frac{ik_1}{m_w}) = -2\frac{ik_1}{m_w} \qquad (4\text{-}5)$$

m_1 matrisinin kofaktörü;

$$cofm_1 = \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_w} & -\frac{ik_1}{m_w} \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}6)$$

m_1 matrisinin adjointi;

$$\text{Adj}m_1 = (cofm_1)^T = \begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_w} & -1 \\ -\frac{ik_1}{m_w} & 1 \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}7)$$

bulunur. Buradan m_1 matrisinin tersi;

$$m_1^{-1} = \frac{\mathrm{Adj}m_1}{\det m_1} = \frac{-m_w}{2ik_1}\begin{pmatrix} -\frac{ik_1}{m_w} & -1 \\ -\frac{ik_1}{m_w} & 1 \end{pmatrix}$$

$$m_1^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{m_w}{2ik_1} \\ \frac{1}{2} & \frac{-m_w}{2ik_1} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}8)$$

olur. m_1^{-1} ve m_2 matrislerini çarparsak

$$m_1^{-1}m_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{m_w}{2ik_1} \\ \frac{1}{2} & \frac{-m_w}{2ik_1} \end{pmatrix} x \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix}$$

$$m_1^{-1}m_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+\frac{k_2 m_w}{2ik_1 m_b} & \frac{1}{2}-\frac{k_2 m_w}{2ik_1 m_b} \\ \frac{1}{2}-\frac{k_2 m_w}{2ik_1 m_b} & \frac{1}{2}+\frac{k_2 m_w}{2ik_1 m_b} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}9)$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1}m_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

buluruz. $M = m_1^{-1}m_2$ 'dir. M matrisi 2x2 'lik bir matris olduğundan;

$$\mathrm{m}=\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A = m_{11}C + m_{12}D \qquad (4\text{-}10)$$

$$B = m_{21}C + m_{22}D$$

yazılabilir.

Dalga fonksiyonları için olasılık yorumları göz önüne alınırsa, fonksiyonların dış bariyerlerde sıfıra gitmesi gerektiği; yani, üstel olarak artan çözümlerin katsayılarının sıfır olması gerektiği görülür. Örneğin ilk bariyerde, **z=0** 'da çözüm;

$$Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \qquad (4\text{-}11)$$

şeklinde idi. **z=-∞** 'da fonksiyonun sonsuza gitmemesi için **B=0** olmalıdır. Benzer şekilde;

$$Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \tag{4-12}$$

çözümünde, **z=∞** 'da fonksiyonun sonsuza gitmemesi için **C=0** olmalıdır.

$$\begin{aligned} A &= m_{12} D \\ 0 &= m_{22} D \end{aligned} \tag{4-13}$$

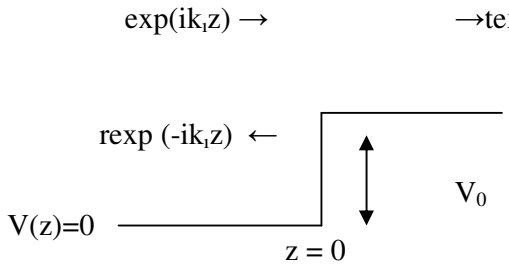
elde edilir. Dolayısıyla son denklemden;

$$\boxed{m_{22}(E) = 0} \tag{4-14}$$

eşitliği bulunur ve bu eşitlik, sayısal yöntemler yardımıyla çözülerek aranılan **E** enerji özdeğerleri belirlenir. Bu yaklaşım **"Transfer Matris Tekniği"** olarak adlandırılır.

4.2.1. Basamak Geçiş Tünelleme Olasılığı

+z yönünde ilerleyen bir elektron, enerjisi E'nin şekil 4-2 de gösterildiği gibi, z=0'da potansiyel basamağın yukarısına doğru ulaştığı sanılır. Burada V(z), z<0 için 0'dan, z>0 için V_0 pozitif değere sıçrar. Klasik olarak bir elektronun enerjisi $E<V_0$ ise elektron genellikle yansıtılır, oysa elektronun enerjisi $E>V_0$ ise genellikle elektron basamak üzerinden geçer. Bu kuantum mekaniğinde elektronun dalga doğası tarafından değiştirilir.



Şekil 4-2: Solda V=0 ve sağda $V=V_0$ potansiyel enerjili z=0 daki bir basamak. Solda yansıyan bir dalga ve sağda ilerleyen bir dalga ile verilen soldan gelen bir dalga vardır.

$z \rangle 0$ ise parçacık potansiyelle etkileşmektedir. Eğer $z \langle 0$ ise parçacık serbesttir. Schrödinger denklemini I. bölgede serbest parçacık için çözersek;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(z,t) = \left(\frac{P^2}{2m} + V(z) \right)\psi(z,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(z,t) + V(z)\psi(z,t) \quad (4\text{-}15)$$

bizim schrödinger denklemimizdir. I. bölgede V(z) =0 ve z<0 olduğundan dolayı

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_1(z) = E\Phi_1(z) \qquad (4-16)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_1(z) = \left(\frac{-2mE}{\hbar^2} \right)\Phi_1(z)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_1(z) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Phi_1(z) = 0$$

dıı . Bura da $\frac{2mE}{\hbar^2}$ *' ye* $k_ı^{\,2}$ *denilirse*;

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_ı(z) + k_ı^{\,2}\Phi_1(z) = 0 \qquad r^2 + k_1^2 = 0 \quad r^2 = -k_1^2$$

$$r_{1,2} = \pm ik_1 \qquad (4-17)$$

dir. Fonksiyon $e^{ik_1 z}$ ve $e^{-ik_1 z}$' ın süperpozisyonu olarak ifade edilirse I. bölge için dalga fonksiyonumuz;

$$\phi_1(z) = \mathrm{A}\, e^{ik_1 z} + \mathrm{B}\, e^{-ik_1 z} \qquad (4\text{-}18)$$

bulunur. Şimdi II. bölge için E> V_0 durumu için çözümleri bulalım. Potansiyel V(z)= V_0 olsun.

$$\hat{H}\Phi_{II}(z) = E\Phi_{II}(z) \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)\right]\Phi_{II}(z) = E\Phi_{II}(z)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + Vo\right]\Phi_{II}(z) = E\Phi_{II}(z)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\ \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_{II}(z) = (E - Vo)\Phi_{II}(z) \qquad (4\text{-}19)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_{II}(z) = \left(\frac{-2m}{\hbar^2}\right)(E - Vo)\Phi_{II}(z)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_{II}(z) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E - Vo)}_{k_2^2 \text{ denilirse}}\Phi_{II}(z) = O$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(Vo - E) \quad r^2 - k_2^2 r^o = 0 \quad r_{1,2} = \mp i k_2 \qquad (4\text{-}20)$$

olur. Fonksiyon $e^{ik_2 z}$ ve $e^{-ik_2 z}$'in süperpozisyonu olarak ifade edilirse II.'ci bölge için dalga fonksiyonumuz

$$\Phi_{II}(z) = Ce^{ik_2 z} + De^{-ik_2 z} \qquad (4\text{-}21)$$

olur. Yani Schrödinger denkleminin çözümü;

$$\Psi(z) = \begin{cases} A\exp(ik_1 z) + B\exp(-ik_1 z) \\ C\exp(ik_2 z) + D\exp(-ik_2 z) \end{cases} \qquad (4\text{-}22)$$

dir. Her zaman olduğu gibi dalga fonksiyonu ve türevi her yerde sürekli olmalıdır.

Sınır şartları irdelenirse, sürekli olması gereksinimi kullanılarak A, B, C ve D sabitlerinin birbirlerine nasıl bağlı oldukları bulunur.

$$\phi_1(0) = \phi_{II}(0) \quad ve \qquad \left(\frac{d\phi_I}{dz}\right)_{z=0} = \left(\frac{d\phi_{II}}{dz}\right)_{z=0} = 0$$

$$\phi_1(z) = Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \qquad \phi_{II}(z) = Ce^{ik_2 z} + De^{-ik_2 z}$$

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0) \Rightarrow Ae^{ik_1 0} + Be^{-ik_1 0} = Ce^{ik_2 0} + De^{-ik_2 0}$$

$$\boxed{\text{A+B= C+D}} \qquad (4\text{-}23)$$

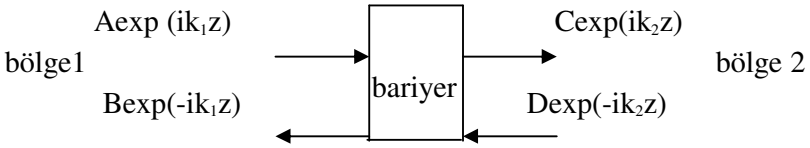
bulunur. Sınırlarda türevlerin sürekliliği şartına göre ise;

$$\frac{d\phi_I}{dz} = ik_I Ae^{ik_1 z} - ik_1 B.e^{-ik_1 z} \qquad \frac{d\phi_{II}}{dz} = ik_2 Ce^{ik_2 z} - ik_2 De^{-ik_2 z}$$

$ik_1A-ik_1B=ik_2C-ik_2D$

$$\frac{k_1}{k_2}(\text{A-B}) = (\text{C-D}) \qquad (4\text{-}24)$$

olur. 2. türev $d^2\Psi/dz^2$, z=0'da basamakta sıçrayan V(z) ile orantılı olduğu için sürekli değildir.



Sekil 4-3: Sol taraftaki I'ci bölgeyle, sağ taraftaki II. bölgeyi ayıran spesifik özellikleri verilmemiş bariyerli bir geçme problemi. Her iki tarafta gelen ve giden dalgalar vardır. Potansiyel sabittir. Yani dalga fonksiyonları düzlem dalgalardır. Fakat bunlar k_1 ve k_2 dalga sayılarına sahip olabilirler.

Eğer sol taraftaki katsayılar bilinirse, sağ taraftaki katsayılar eş zamanlı (4-23) ve (4-24) denklemleri çözülerek;

$$2C= (1+\frac{k_1}{k_2}) A + (1- \frac{k_1}{k_2}) B \qquad (4\text{-}25)$$

$$C=\frac{1}{2k_2} (k_1+ k_2) A+1 (k_2-k_1) B$$

ve

$$2D=A (1-\frac{k_1}{k_2}) +B (1+\frac{k_1}{k_2})$$

$$D= \frac{1}{2k_2} \quad (k_2-k_1) A + \frac{1}{2k_2} (k_1+k_2) B \qquad (4\text{-}26)$$

bulunur. Şekil (4-2)'nin daha basit bir durumu ile ilişkili olarak A=1, B=r, C=t ve D=0 değerleri ayarlanarak (4-24) ve (4-25) denklemleri de yerine yazılırsa

$$t =\frac{1}{2k_2} (k_1+k_2) + \frac{1}{2k_2} (k_2-k_1) r \qquad (4\text{-}27)$$

$$0= \frac{1}{2k_2} (k_2-k_1) + \frac{1}{2k_2} (k_1+k_2) r$$

olur. Buradan yansıma katsayısı

$$\boxed{r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}} \qquad (4\text{-}28)$$

bulunur. 1.'ci denklemde r yerine yazılarak geçirme katsayısı *t*,

$$t = \frac{1}{2k_2} \quad [(k_1+k_2)+ (k_2-k_1) (\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2})]$$

$$= \frac{1}{2k_2} \quad [\frac{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)}]$$

$$= 1 \; [\frac{(k_1 + k_2 - k_1 + k_2)(k_1 + k_2 + k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)}]$$

$$= \frac{1}{2k_2}\left[\frac{2k_2 2k_1}{k_1 + k_2}\right]$$

$$\boxed{t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}} \qquad (4\text{-}29)$$

bulunur. Genellikle, dalganın genliğinden ziyade elektronun akım ve akısı bilinmek istenir. Bir $F.e^{ikx}$ dalgası,genlik gibi dalga sayısına bağlı olan (hk/m) $|F|^2$ akım yoğunluğu taşır. Akı yansıma ve geçme katsayıları, bu yüzden akımların oranıdır.

$$T = \frac{V_2|C|^2}{V_1|A|^2} = \frac{(hk_2/m)|t|^2}{(hk_1/m)} = \frac{k_2}{k_1}|t|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \qquad (4\text{-}30)$$

$$R = \frac{V_2|B|^2}{V_1|A|^2} = \frac{(hk_1/m)|r|^2}{(hk_1/m)} = r^2 = (\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2})^2 \qquad (4\text{-}31)$$

Bu katsayıların toplamı 1'dir.

$$R+T=1 \qquad (4\text{-}32)$$

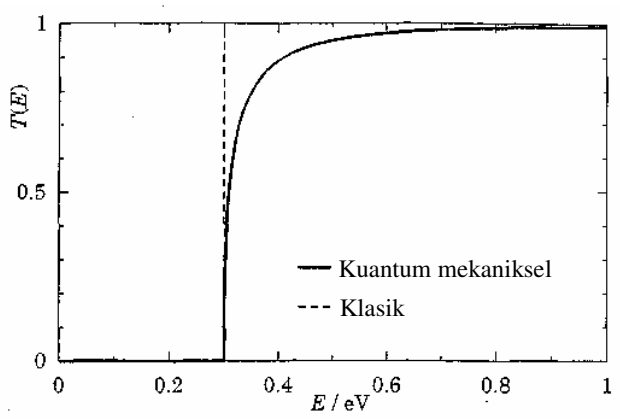
Eğer E<V_0 olursa, basamağın sağındaki $\kappa_2^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$ ile verilen κ_2 dalga sayılı dalgalar kaybolur. Giden dalga Ce^{ik_2z}, den, azalan üstelde $Ce^{-\kappa_2 z}$ ye değişir ve gelen dalga artan $De^{\kappa_2 z}$ olur. Böylece k_2, $i\kappa_2$ ile yer değiştirir. k_2, nin $-i\kappa_2$ 'den ziyade $+i\kappa_2$ olması önemlidir.

Dalgalar z=0'da tekrar uyumlu hale getirilmiş olabilir. Veya basit bir şekilde $k_2 \rightarrow i\kappa_2$ değişimi kullanılırsa

$$t = \frac{2k\imath}{k\imath + i\kappa_2} \qquad r = \frac{k\imath - i\kappa_2}{k\imath + i\kappa_2} \tag{4-33}$$

elde edilir. Bunlar komplekstir.

T=0 ve R = $|r|^2$ = 1 olduğu için akı, sadece azalan dalga $te^{-\kappa_2 z}$ ile taşınmaz. Böylece klasik olarak mükemmel akı yansıması vardır. Üstel bir dalga fonksiyonu bariyere tünellenir fakat akım taşımaz.



Şekil4-4: GaAs'ta 0,3 eV basamak için gelen $\bar{e}$'nun E enerjisinin bir fonksiyonu olarak T(E) geçme katsayısı

Geçirme katsayısı T(E) şekil 4-4'te çizilmiştir. Klasik olarak geçme, basamağın üzerinde bütün enerjiler için T=1 olabilir. Fakat kuantum mekaniksel yaklaşımda bu durum sadece yüksek enerjiler için söz konusudur.

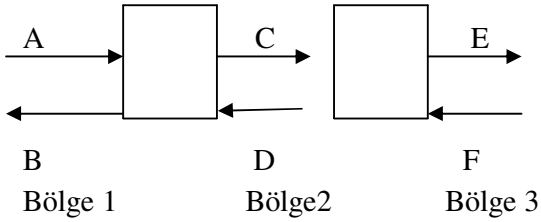
Aslında V_0'a doğru E azaldığı için karekök gibi T→0 gider. Sınırlandırılmış elektronlarda basamaklar önemli olmasına rağmen daha kullanışlı bir yapı, bariyer şekline yukarı ve aşağı doğru basamağı birlikte yerleştirerek yapılabilir.

Bu, basamak olarak, aynı yolla dalga fonksiyonu uyumlu yapılarak verilebilir fakat daha genel ve ilginç bir teknik olan T matrisi yöntemi kullanılmaktadır.

Şimdi sağ tarafındaki dalgayı sol taraftaki dalganın bir fonksiyonu olarak veren transfer matrislerine konsantre olalım. Şekil (4-3)'e göre

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \mathrm{T}^{(21)} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}^{(21)} T_{12}^{(21)} \\ T_{21}^{(21)} T_{22}^{(21)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \qquad (4\text{-}34)$$

yazılır. T matrisini seçmekteki amacımız bunların bir boyuttaki karmaşık bariyerleri oluşturmak üzere kolayca çarpılabilmeleridir.



Şekil 4-5: Potansiyel enerjinin sabit olduğu ve iki bariyerle ayrılmış olan üç bölgedeki dalgalar T matrislerinin bütün geçirgenliklerini elde etmek için nasıl çarpılabileceğini göstermek içindir.

Bu durum elektronları saçan iki özellikli bariyer tarafından ayrılan üç düzlem potansiyel bölgesi için şekil (4-5)'te gösterilmektedir. Bu üç bölgedeki dalgaların genlikleri eklemler için T matrisleri ile ilişkilidir.

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = T^{(21)} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = T^{(32)} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \qquad (4\text{-}35)$$

Bu açık bir şekilde denklem (4-36)'i vermek üzere birleştirilebilir.

$$\begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = T^{(32)} T^{(21)} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \equiv T^{(31)} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \qquad (4\text{-}36)$$

Burada $T^{(31)} = T^{(32)}\, T^{(21)}$, dir. Bu üst indisin mertebesini açıklar ve potansiyel içerisindeki özelliklerin keyfi bir sayısına açık bir şekilde genişletilebilir. Uzaydaki bölgeler geleneksel olarak soldan sağa numaralandırılsa bile matrisler aksi düzende yazılmalıdır. Yani; bunlar uygun bir sıralamada dalgaların genlikleri üzerinde etki gösterirler.

Yansıma ve geçme genlikleri T'nin elemanlarından tekrar elde edilebilir. Sol ve sağ bölgelerdeki dalgalar

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11}\, T_{12} \\ T_{21}\, T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \tag{4-37}$$

ile ilişkilendirilir. Burada;

$$r = -\frac{T_{21}}{T_{22}} \qquad t = \frac{T_{11} T_{22} - T_{12} T_{21}}{T_{22}} \tag{4-38}$$

olur. t için yazılan numaralandırma sık sık 1'dir ve $t = \frac{1}{T_{22}}$ olur. Adım için T-matrisi denk (4-25) ifadesinden

$$T^{(21)} = \frac{1}{2k_2} \begin{pmatrix} k_2 + k_1 & k_2 - k_1 \\ k_2 - k_1 & k_2 + k_1 \end{pmatrix} \equiv T(k_2, k_1) \tag{4-39}$$

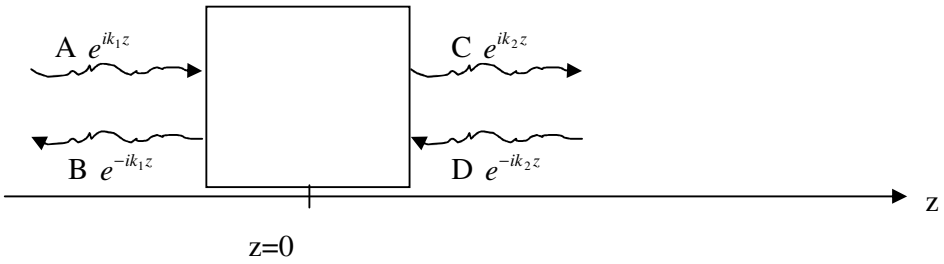
olarak elde edilir. Bu ifade $E>V_0$ içindir; $E<V_0$ ise $k_2 = i\kappa_2$'dir. Mevcut tartışılan matris orijinde bir adım içindir ve z=d'de bir adıma genelleştirme yapmak için kullanışlı olacaktır. Sadece fark cisimlere çarpan dalgaların fazlarından kaynaklanmaktadır.

Bu fazlar için yeni bir T(d) matrisini orijindeki T(0)'dan 3 adımda üretilmesine olanak sağlayabiliriz.

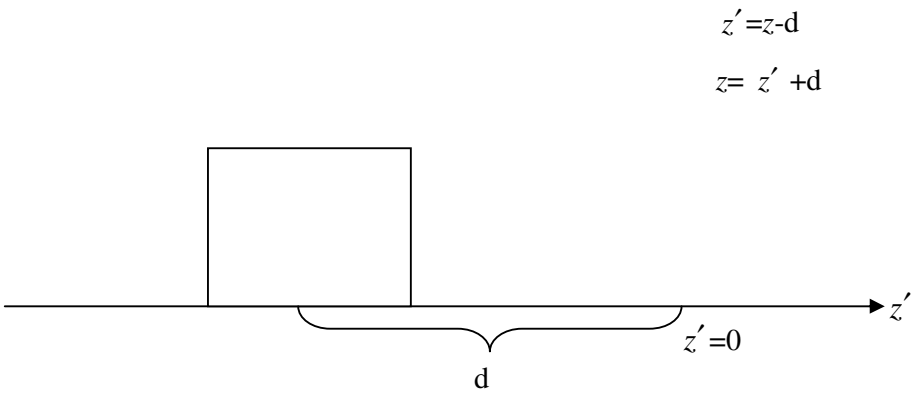
(i) z'=z-d yazarak cismi d'den orijine taşır, soldan gelen $e^{ik_1 z}$ dalgası $e^{ik_1 z'}.e^{ik_1 d}$ halini alır. Böylece buna karşılık gelen genliği $e^{ik_1 d}$ ile çarpma ihtiyacı duyarız. Benzer bir şekilde soldan giden dalganın genliği $e^{-ik_1 d}$ ile çarpılmaya ihtiyaç duyarız. Bu iki çarpan orijinal genliklerin vektörlerini çarpan diyagonal bir matris olarak yazılabilir.

(ii) T(0) orijininde hesaplanan T matrisi sağdaki genlikleri vermek üzere kullanılabilir.

(iii) Cisim şimdi z=z'+d kullanılarak yeniden d'ye çekilmelidir. Bu durum tekrar faz çarpanlarını tanımlar. Bunlar adım 1'dekilere göre zıt işaretlere sahiptirler ve k_1'den ziyade k_2 dalga sayısını ihtiva ederler yine bunlar bir diyagonal matris olarak yazılabilirler. Dolayısıyla d'deki bir nesne için T(d)'yi orijindeki nesne için tanımlı olan parametrelere bağlı olarak yazabiliriz.



Şekil 4-6: z=0 noktasındaki bir engel



Şekil 4-7: z=-d noktasındaki engel

Bildiğimiz gibi;

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{4-40}$$

eşitliği olduğuna göre;

$$(Ce^{ik_2 z} + De^{-ik_2 z}) = T(0)\ (Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z}) \tag{4-41}$$

z yerine $z'+d$ değerini yazarsak;

$$(C.\ e^{ik_2(z'+d)} + D\,e^{-ik_2(z'+d)}) = T(0)(Ae^{ik_1(z'+d)} + \mathbf{B}e^{-ik_1(z'+d)}) \tag{4-42}$$

olur. $e^{ik_2 z'}$' leri ihmal edersek;

$$\begin{pmatrix} C\,e^{ik_2 d} \\ De^{-ik_2 d} \end{pmatrix} = T(0) \begin{pmatrix} A\,e^{ik_1 d} \\ Be^{-ik_1 d} \end{pmatrix} \tag{4-43}$$

olur. Bu ifadeyi daha açık yazacak olursak;

$$\begin{pmatrix} A\,e^{ik_1 d} \\ Be^{-ik_1 d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{4-44}$$

olduğundan;

$$\begin{pmatrix} e^{ik_2 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T(0) \begin{pmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{4-45}$$

yazabiliriz.

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-ik_2 d} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 d} \end{pmatrix} T(0) \begin{pmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{pmatrix}}_{\mathrm{T\,(d)}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{4-46}$$

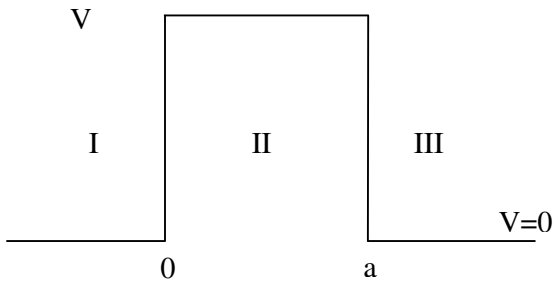
$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T(d) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ olduğundan dolayı,

$$T(d)=\begin{pmatrix} e^{-ik_2 d} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 d} \end{pmatrix} T(0) \begin{pmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}47)$$

Bu formülü adımların bir dizisinden oluşan daha karmaşık potansiyelleri üretmek için bize yardımcı olacak şekilde çok faydalı hale getirebiliriz. Potansiyel ve dalga sayısı cismin her iki tarafında aynı ise örneğin (adımdan ziyade kare engel) dönüşüm formülü oldukça daha basit bir hal almaktadır. Çünkü iki dış kenar matrisi birbirinin tersi haline gelmektedir ve $T(d)=A^{-1}(d)T(0)A(d)$. Burada A faz çarpanlarıdır. Bu T'nin bir benzerlik dönüşümüdür. Onun determinant gibi özelliklerini korur.

4.2. Potansiyel Engeli

V potansiyeline sahip tek engel yapıyı inceleyelim.



Şekil 4-8: Tek engel yapı

I. bölgedeki dalga fonksiyonu Ψ_1, II bölgedeki dalga fonksiyonu Ψ_2 ve III. bölgedeki dalga fonksiyonu Ψ_3,

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \text{..... } z<0 \\ \Psi_2 &= Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \text{..... } 0<z<a \\ \Psi_3 &= Fe^{ik_1 z} + Ge^{-ik_1 z} \text{..... } a<z \end{aligned} \qquad (4\text{-}48)$$

biçiminde verilir ve buradaki k_1 ve k_2 dalga vektörleri

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V-E)}{\hbar^2}} \tag{4-49}$$

dir. **E<V** olduğu kabul edilmiştir.

z=0 'da süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &A + B = C + D \\ &\frac{1}{m_w}(ik_1 A - ik_1 B) = \frac{1}{m_b}(k_2 C - k_2 D) \end{aligned} \tag{4-50}$$

yazılır. **z=a 'da** süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &Ce^{k_2 a} + De^{-k_2 a} = Fe^{ik_1 a} + Ge^{-ik_1 a} \\ &\frac{1}{m_b}(k_2 Ce^{k_2 a} - k_2 De^{-k_2 a}) = \frac{1}{m_w}(ik_1 Fe^{ik_1 a} - ik_1 Ge^{-ik_1 a}) \end{aligned} \tag{4-51}$$

elde edilir. Bu ifadeleri matris formunda yazacak olursak

$$\begin{aligned} &m_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad ; \quad m_3 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = m_4 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \\ &m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_w} & \frac{-ik_1}{m_w} \end{pmatrix} \quad ; \quad m_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix} \\ &m_3 = \begin{pmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \frac{k_2 e^{k_2 a}}{m_b} & -\frac{k_2 e^{-k_2 a}}{m_b} \end{pmatrix} \quad ; \quad m_4 = \begin{pmatrix} e^{ik_1 a} & e^{-ik_1 a} \\ \frac{ik_1 e^{ik_1 a}}{m_w} & -\frac{ik_1 e^{-ik_1 a}}{m_w} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4-52}$$

ifadeleri elde edilir. m_1 ve m_3 'ün tersini bulalım;

$$m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \dfrac{ik_1}{m_w} & \dfrac{-ik_1}{m_w} \end{pmatrix}$$

m_1 matrisinin determinantı;

$$\det m_1 = (-\frac{ik_1}{m_w}) - (\frac{k_1}{m_w}) = -\frac{2ik_1}{m_w} \qquad (4\text{-}53)$$

m_1 matrisinin kofaktörü;

$$cofm_1 = \begin{pmatrix} -\dfrac{ik_1}{m_w} & -\dfrac{ik_1}{m_w} \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}54)$$

m_1 matrisinin adjointi;

$$\mathrm{Adj}m_1 = (cofm_1)^T = \begin{pmatrix} -\dfrac{ik_1}{m_w} & -1 \\ -\dfrac{ik_1}{m_w} & 1 \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}55)$$

m_1 matrisinin tersi;

$$m_1^{-1} = \frac{\mathrm{Adj}m_1}{\det m_1} = \frac{-m_w}{2ik_1}\begin{pmatrix} -\dfrac{ik_1}{m_w} & -1 \\ -\dfrac{ik_1}{m_w} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{2} & \dfrac{m_w}{2ik_1} \\ \dfrac{1}{2} & \dfrac{-m_w}{2ik_1} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}56)$$

olur. m_3 matrisi;

$$m_3 = \begin{pmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 a}}{m_b} & \dfrac{k_2 e^{-k_2 a}}{m_b} \end{pmatrix}$$

şeklindedir.

m_3 matrisinin determinantı;

$$\det m_3 = (-\frac{k_2}{m_b} e^{-k_2 a} e^{k_2 a}) - (\frac{k_2}{m_b} e^{-k_2 a} e^{k_2 a}) = -\frac{k_2}{m_b} - \frac{k_2}{m_b} = -\frac{2k_2}{m_b} \qquad (4\text{-}57)$$

m_3 matrisinin kofaktörü;

$$cofm_3 = \begin{pmatrix} -\frac{k_2}{m_b}e^{-k_2a} & -\frac{k_2}{m_b}e^{k_2a} \\ -e^{-k_2a} & e^{k_2a} \end{pmatrix} \tag{4-58}$$

m_3 matrisinin adjointi;

$$\mathrm{Adj}m_3 = (cofm_3)^T = \begin{pmatrix} -\frac{k_2}{m_b}e^{-k_2a} & -e^{-k_2a} \\ -\frac{k_2}{m_b}e^{k_2a} & e^{k_2a} \end{pmatrix}$$

m_3 matrisinin tersi;

$$m_3^{-1} = \frac{\mathrm{Adj}m_3}{\det m_3} = \frac{-m_b}{2k_2}\begin{pmatrix} -\frac{k_2}{m_b}e^{-k_2a} & -e^{-k_2a} \\ -\frac{k_2}{m_b}e^{k_2a} & e^{k_2a} \end{pmatrix}$$

$$m_3^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-k_2a}}{2} & \frac{m_b}{2k_2}e^{-k_2a} \\ \frac{e^{k_2a}}{2} & -\frac{m_b}{2k_2}e^{k_2a} \end{pmatrix} \tag{4-60}$$

olur. m_1'in tersi ile m_2'yi çarparsak;

$$m_1^{-1}m_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+\frac{k_2m_w}{2ik_1m_b} & \frac{1}{2}-\frac{k_2m_w}{2ik_1m_b} \\ \frac{1}{2}-\frac{k_2m_w}{2ik_1m_b} & \frac{1}{2}+\frac{k_2m_w}{2ik_1m_b} \end{pmatrix} \tag{4-61}$$

olur. Daha sonra m_3'ün tersi ile çarparsak;

$$m_1^{-1}m_2m_3^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\cosh k_2a-\frac{k_2m_w}{2ik_1m_b}\sinh k_2a & \frac{-m_b}{2k_2}\sinh k_2\mathrm{a}+\frac{k_2m_w}{2ik_1k_2}\cosh k_2a \\ \frac{1}{2}\cosh k_2a+\frac{k_2m_w}{2ik_1m_b}\sinh k_2a & \frac{-m_b}{2k_2}\sinh k_2\mathrm{a}-\frac{k_2m_w}{2ik_1k_2}\cosh k_2a \end{pmatrix} \tag{4-62}$$

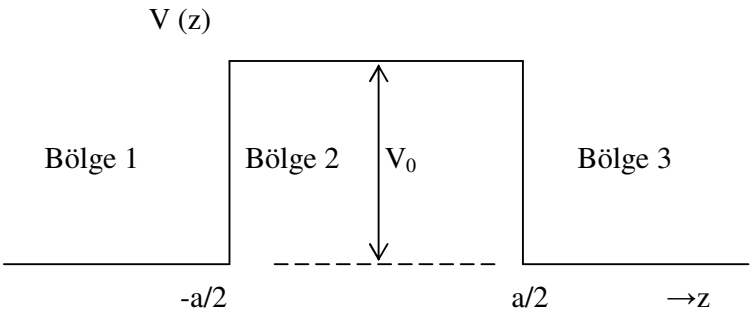
olur. Bu ifadeyi m_4 ile çarparsak M matrisini buluruz.

$$m_1^{-1} m_2 m_3^{-1} m_4 = M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \text{ dersek;} \tag{4-63}$$

$$M_{22} = \frac{k_2 m_w}{2ik_1 m_b} e^{-k_1 a} \sinh k_2 a + \frac{ik_1 m_b}{2k_2 m_w} e^{-k_1 a} \sinh k_2 a + e^{-k_1 a} \cosh k_2 a \tag{4-64}$$

M_{22} ifadesini sıfıra eşitleyerek enerjiyi bulabiliriz.

4.2.1. Engelin Geçme (Tünelleme) Olasılığı



Şekil 4-9: $|z| < \frac{a}{2}$ için V (z) = V_0 diğer yerlerde V (z) = 0 olan potansiyel basamağı

Parçalar üzerinde dikdörtgensel bir potansiyel için T'yi oluşturabiliriz. Şekil 4-9'da gösterildiği gibi $|z| < \frac{a}{2}$ için V (z) = V_0 potansiyel durumunda bariyeri V (z) = V_0 ile orijine merkezleyip E> V_0 kabul edelim. Sağ ve sol taraftaki potansiyellerin her ikisi de sıfırdır dolayısıyla k_3=k_1'dir. T matrisi bu iki basamaktan oluşturulabilir. Başlangıçta dalga sayısı k_1'den k_2'ye değişir. Orijindeki basamakta kullanılan (4-39) denklemi için z= -a/2'ye çevrilerek denklem (4-47) yeniden düzenlenebilir.

İkinci basamaktaki dalga sayısı k_2'den k_1= k_3'e zıt doğrultuda değişir, yani denklem (4-39) da z= $\frac{a}{2}$ olan denk. (4-47)'ye dönüştürmeden önce k_1 ve k_2'yi birbiriyle değiştiririz. Bu iki basamağın ürünü;

$$T^{(31)} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1 a/2} & O \\ O & e^{ik_1 a/2} \end{pmatrix} T(k_1,k_2) \begin{pmatrix} e^{ik_2 a/2} & O \\ O & e^{-ik_2 a/2} \end{pmatrix}$$
$$x \quad \begin{pmatrix} e^{ik_2 a/2} & O \\ O & e^{-ik_2 a/2} \end{pmatrix} T(k_2,k_1) \begin{pmatrix} e^{-ik_1 a/2} & O \\ O & e^{ik_1 a/2} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}65)$$

verir. Adımlar arasındaki geçişlerde faz değişiminin yansıması diagonalde, orta çiftlerin exp ($\pm ik_2a$) ile verilen matris ile çarpımıyla basit bir şekilde yapılabilir.

$$T^{(31)} = \frac{1}{2k_1k_2} \begin{pmatrix} e^{-ik_1 a/2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 a/2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2k_1 k_2 \cos k_2 a + i\,(k_1^2 + k_2^2) \sin k_2 a & -i\,(k_1^2 - k_2^2) \sin k_2 a \\ i\,(k_1^2 - k_2^2) \sin k_2 a & 2k_1 k_2 \cos k_2 a - i\,(k_1^2 + k_2^2) \sin k_2 a \end{pmatrix}$$

$$x \begin{pmatrix} e^{-ik_1 a/2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 a/2} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}66)$$

Orta bölüm kesin pozisyonu yoksa bariyerin genişliğinin fonksiyonudur. Örneğin, eğer bariyer 0-a arasında ise, yer değiştirme her iki tarafın faz faktörlerine girer. Sonuç çarpıldıktan sonra $T^{(31)}$'in elemanları daha küçüktür.

$$T_{21}^{(31)} = \frac{i(k_1^2 - k_2^2)\sin k_2 a}{2k_1 k_2} \qquad (4\text{-}67)$$

$$T_{22}^{(31)} = \frac{2k_1 k_2 \cos k_2 a - i(k_1^2 + k_2^2)\sin k_2 a}{2k_1 k_2} e^{ik_1 a} \qquad (4\text{-}68)$$

Sonraki bölümde $T_{11} = T_{22}^{*}$ ve $T_{12} = T_{21}^{*}$ ile verilen ve det |T|= 1 olan 2 girişin genel sonuçları türetilir ve sonrasında geçiş genliği

$$t = \frac{T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21}}{T_{22}} = \frac{1}{T_{22}} = \frac{2k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{2k_1 k_2 \cos k_2 a - i(k_1^2 + k_2^2)\sin k_2 a} \qquad (4\text{-}69)$$

olarak elde edilir. Akı katsayısı T= $|t|^2$

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2+(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2 k_2 a} = \left(1+\frac{V_0^{\,2}}{4E(E-V_0)}\sin^2 k_2 a\right) \quad (4\text{-}70)$$

ifadesi ile verilir. Burada $k_2 = (2m\,(E\text{-}V_0)/\hbar^2)^{1/2}$, dir.

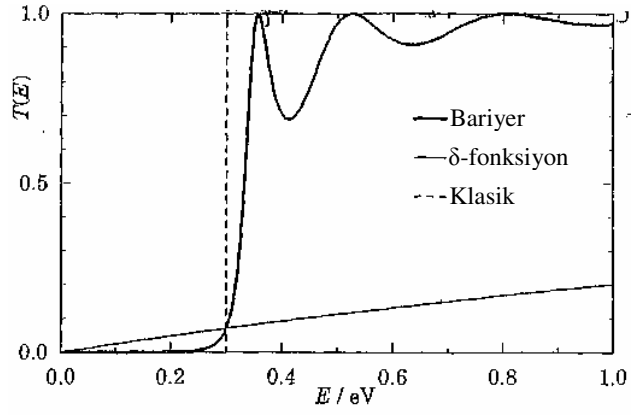
Yansıma katsayısı R= 1-T' dir. Eğer $E < V_0$ ise genellikle $k_2 \rightarrow i\kappa_2$ olarak alınır. Böylece $\sin k_2 a = \sin i\kappa_2 a = i \sinh \kappa_2 a$'ya eşittir ve geçiş katsayısı;

$$T = \frac{4k_1^2\kappa_2^2}{4k_1^2\kappa_2^2+(k_1^2+k_2^2)^2\sin h^2\kappa_2 a} = \left(1+\frac{V_0^{\,2}}{4E(V_0-E)}\sinh^2 \kappa_2 a\right)^{-1} \qquad (4\text{-}71)$$

şeklini alır. Burada $\kappa_2 = (2m\,(V_0 - E)/\hbar^2)^{1/2}$ ifadesi ile verilmektedir. $E= V_0$, bariyerin üstünde enerji eşlemesi özel durumu için geçiş katsayısı

$$T\,(E=V_0) = \left(1+\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}\right)^{-1} \qquad (4\text{-}72)$$

şeklindedir.



Şekil 4-10: GaAs'da a=10 nm kalınlığında ve V_0=0,SeV yüksekliğinde kare potansiyel bariyer için geçiş katsayısının enerjinin fonksiyonu olarak gösterimi.

İnce çizgi s=V_0.a ile verilen aynı şiddetli δ-fonksiyon bariyeri içindir. Kesik çizgi ise aynı yükseklikteki bariyer için klasik sonuçtur.

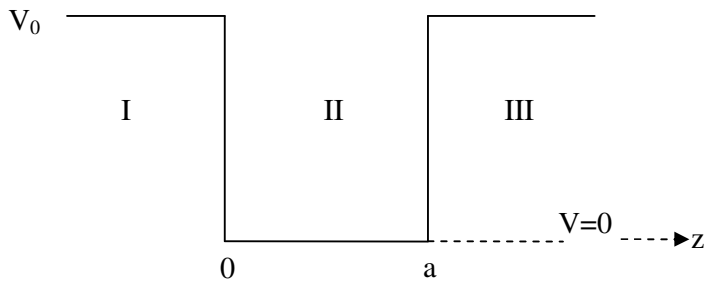
Şekil 4-10'da geçiş katsayısı çizilmiştir. Klasik olarak E<V_0 için T=0 ve E>V_0 için T= 1'dir. Kuantum mekaniği E<V_0 için elektronun bariyere doğru tünellemesine izin verir. Bununla birlikte geçiş olasılığı küçük olabilir. Eğer $\kappa_2 a$ büyük ise denk. (4-71) yaklaşık olarak;

$$T \approx \frac{16e}{V_0}\exp(-2\kappa_2 a) \qquad (4\text{-}73)$$

gibi genişletilebilir. Bu üstel terim tarafından baskılanır. exp (-2κ_2a) herhangi bir bariyer içine tünelleme olasılığı için basitçe tahmin edilir. E>V_0 iken, geçiş katsayısı sadece sink$_2$a=0 ve bariyerde yarım dalga sayısı tamsayı olduğunda uyum içindedir.

4.3. Kuantum Kuyu Problemi

V_0 yüksekliğinde tek kuantum kuyuyu inceleyelim;



Şekil 4-11: Tek Kuantum Kuyu

I. bölgedeki dalga fonksiyonu $\psi_{1,}$ II. bölgedeki dalga fonksiyonu ψ_2 ve III. bölgedeki dalga fonksiyonu ψ_{III} şu şekilde yazılır:

$$\Psi_1 = Ae^{k_2 z} + Be^{-k_2 z} \ldots\ldots \qquad z<0$$
$$\Psi_2 = C\sin k_1 z + D\cos k_1 z \ \ \ldots\ldots \ 0<z<a \tag{4-74}$$
$$\Psi_3 = Fe^{k_2 z} + Ge^{-k_2 z} \ldots\ldots \qquad a<z$$

dalga vektörü k_1 ve k_2 ise;

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{4-75}$$

dir. **z=0 'da;** süreklilik şartına göre;

$$A + B = D$$
$$\frac{1}{m_b}(k_2 A - k_2 B) = \frac{1}{m_w}(k_1 C) \tag{4-76}$$

z=a 'da; süreklilik şartına göre;

$$C\sin k_1 a + D\cos k_1 a = Fe^{k_2 a} + Ge^{-k_2 a}$$
$$\frac{1}{m_w}(k_1 C\cos k_1 a - k_1 D\sin k_1 a) = \frac{1}{m_b}(k_2 Fe^{k_2 a} - k_2 Ge^{-k_2 a}) \tag{4-77}$$

yazılır. Bu ifadeler matris formunda yazılarak,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{k_1}{m_w} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \qquad (z=0)$$
$$\begin{pmatrix} \sin k_1 a & \cos k_1 a \\ \frac{1}{m_w}k_1\cos k_1 a & -\frac{1}{m_w}k_1\sin k_1 a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \frac{1}{m_b}k_2 e^{k_2 a} & -\frac{1}{m_b}k_2 e^{-k_2 a} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \qquad (z=a) \tag{4-78}$$

$$m_1\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_2\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad ; \quad m_3\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = m_4\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1}m_2\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = m_3^{-1}m_4\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \tag{4-79}$$
$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1}m_2 m_3^{-1}m_4\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$
$$M = m_1^{-1}m_2 m_3^{-1}m_4$$

$$m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix} \quad ; \quad m_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{k_1}{m_w} & 0 \end{pmatrix} \tag{4-80}$$

$$m_3 = \begin{pmatrix} \sin k_1 \mathrm{a} & \cos k_1 a \\ \frac{1}{m_w} k_1 \cos k_1 a & -\frac{1}{m_w} k_1 \sin k_1 a \end{pmatrix} \quad ; \quad m_4 = \begin{pmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \frac{1}{m_b} k_2 e^{k_2 a} & -\frac{1}{m_b} k_2 e^{-k_2 a} \end{pmatrix}$$

elde edilir. Şimdi, m_1 matrisinin tersini bulalım;

$$m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix} ; \quad \det m_1 = (-\frac{k_2}{m_b}) - (\frac{k_2}{m_b}) = -2\frac{k_2}{m_b} \tag{4-81}$$

m_1 matrisinin kofaktörü;

$$cofm_1 = \begin{pmatrix} -\frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{4-82}$$

m_1 matrisinin Adjointi;

$$\mathrm{Adj}m_1 = (cofm_1)^T = \begin{pmatrix} -\frac{k_2}{m_b} & -1 \\ -\frac{k_2}{m_b} & 1 \end{pmatrix} \tag{4-83}$$

m_1 matrisinin tersi;

$$m_1^{-1} = \frac{\mathrm{Adj}m_1}{\det m_1} = \frac{-m_b}{2k_2} \begin{pmatrix} -\frac{k_2}{m_b} & -1 \\ -\frac{k_2}{m_b} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{m_b}{2k_2} \\ \frac{1}{2} & \frac{-m_b}{2k_2} \end{pmatrix} \tag{4-84}$$

olarak elde edilir. Şimdi de m_3 matrisinin tersini bulalım. Bunun için öncelikle detm_3, cof m_3 ve Adj m_3'ü bulmamız gerekiyor.

$$m_3 = \begin{pmatrix} \sin k_1 \mathrm{a} & \cos k_1 a \\ \frac{1}{m_w} k_1 \cos k_1 a & -\frac{1}{m_w} k_1 \sin k_1 a \end{pmatrix}$$

m_3 matrisinin determinantı;

$$\det m_3 = (-\frac{k_1}{m_w} \sin^2 k_1 a) - (\frac{k_1}{m_w} \cos^2 k_1 a) = -\frac{k_1}{m_w} (\sin^2 k_1 a + \cos^2 k_1 a) \tag{4-85}$$

$$= -\frac{k_1}{m_w}$$

m_3 matrisinin kofaktörü;

$$cofm_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{m_w}k_1 \sin k_1 a & -\frac{1}{m_w}k_1 \cos k_1 a \\ -\cos k_1 a & \sin k_1 \mathrm{a} \end{pmatrix} \tag{4-86}$$

m_3 matrisinin adjointi;

$$\mathrm{Adj}m_3 = (cofm_3)^T = \begin{pmatrix} -\frac{1}{m_w}k_1 \sin k_1 a & -\cos k_1 a \\ -\frac{1}{m_w}k_1 \cos k_1 a & \sin k_1 \mathrm{a} \end{pmatrix} \tag{4-87}$$

m_3 matrisinin tersi;

$$m_3^{-1} = \frac{\mathrm{Adj}m_3}{\det m_3} = \frac{-m_w}{k_1}\begin{pmatrix} -\frac{1}{m_w}k_1 \sin k_1 a & -\cos k_1 a \\ -\frac{1}{m_w}k_1 \cos k_1 a & \sin k_1 \mathrm{a} \end{pmatrix}$$

$$m_3^{-1} = \begin{pmatrix} \sin k_1 a & \frac{m_w}{k_1}\cos k_1 a \\ \cos k_1 a & -\frac{m_w}{k_1}\sin k_1 \mathrm{a} \end{pmatrix} \tag{4-88}$$

olarak elde edilir. m_1'in tersi ile m_2'yi çarparsak;

$$m_1^{-1}m_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{m_b}{2k_2} \\ \frac{1}{2} & \frac{-m_b}{2k_2} \end{pmatrix} x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{k_1}{m_w} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_1 m_b}{2k_2 m_w} & \frac{1}{2} \\ -\frac{k_1 m_b}{2k_2 m_w} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{4-89}$$

olur. Daha sonra m_3'ün tersi ile çarparsak;

$$m_1^{-1}m_2m_3^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{k_1 m_b}{2k_2 m_w} & \frac{1}{2} \\ -\frac{k_1 m_b}{2k_2 m_w} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} x \begin{pmatrix} \sin k_1 a & \frac{m_w}{k_1}\cos k_1 a \\ \cos k_1 a & -\frac{m_w}{k_1}\sin k_1 \mathrm{a} \end{pmatrix} \tag{4-90}$$

olur. Bu çarpımı m_4 ile çarparsak M matrisini buluruz.

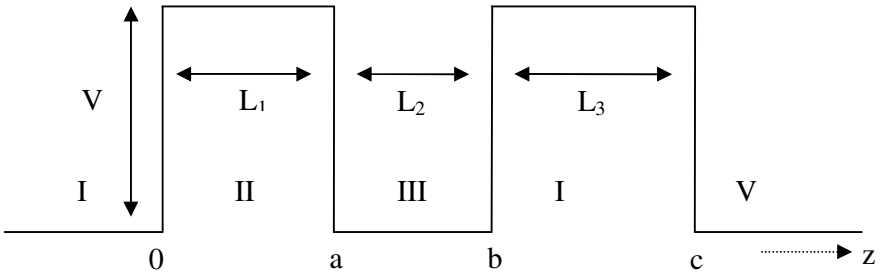
$$m_1^{-1}m_2m_3^{-1}m_4 = M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \quad \text{dersek;} \tag{4-91}$$

$$M_{22} = -\frac{k_1 m_b}{2k_2 m_w}\sin k_1 a e^{-k_2 a} + \cos k_1 a e^{-k_2 a} + \frac{k_2 m_w}{2k_1 m_b}\sin k_1 a e^{-k_2 a} \tag{4-92}$$

Buradan, M_{22} ifadesini sıfıra eşitleyerek enerjiyi bulabiliriz.

4.4. Simetrik Çift Engel Durumu

İki adet tek engelin, aynı kristal içerisinde birbirlerinden çok küçük bir mesafede (örneğin birkaç nm) bir araya getirilmesi ile oluşturulmuş yapı "**Çift Bariyer"** olarak adlandırılır ve tek engelden oldukça farklı iletim özelliklerine sahiptir.



Şekil 4-12: Simetrik Çift Engel

Her iki engelinde aynı V potansiyel yüksekliğine; fakat farklı genişliklere sahip olduğu durumu irdeleyelim. Dalga fonksiyonlarımız ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4, ψ_5 olsun.

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \text{..... } z<0 \\
\Psi_2 &= Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \text{..... } 0<z<a \\
\Psi_3 &= Ee^{ik_1 z} + Fe^{-ik_1 z} \text{..... } a<z<b \\
\Psi_4 &= Ge^{k_2 z} + He^{-k_2 z} \text{..... } b<z<c \\
\Psi_5 &= Ie^{ik_1 z} + Je^{-ik_1 z} \text{..... } c<z
\end{aligned} \tag{4-93}$$

Dalga vektörlerimiz k_1 ve k_2'dir.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V-E)}{\hbar^2}} \tag{4-94}$$

Dalga fonksiyonu ve türevlerinin **z=0, a, b** ve **c** ara yüzeylerindeki sürekliliğinden yola çıkılarak, katsayılar arasında bir ilişki kurulabilir ve sonuçta **E** enerji özdeğerleri belirlenebilir. Etkin kütle farklılığı da göz önünde bulundurulur. Transfer matris tekniği, bu çift bariyer yapıya uygulanırsa;

z=0 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &A + B = C + D \\ &\frac{1}{m_w}(ik_1 A - ik_1 B) = \frac{1}{m_b}(k_2 C - k_2 D) \end{aligned} \tag{4-95}$$

z=a 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &Ce^{k_2 a} + De^{-k_2 a} = Ee^{ik_1 a} + Fe^{-ik_1 a} \\ &\frac{1}{m_b}(k_2 Ce^{k_2 a} - k_2 De^{-k_2 a}) = \frac{1}{m_w}(ik_1 Ee^{ik_1 a} - ik_1 Fe^{-ik_1 a}) \end{aligned} \tag{4-96}$$

z=b 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &Ee^{ik_1 b} + Fe^{-ik_1 b} = Ge^{k_2 b} + He^{-k_2 b} \\ &\frac{1}{m_w}(ik_1 Ee^{ik_1 b} - ik_1 Fe^{-ik_1 b}) = \frac{1}{m_b}(k_2 Ge^{k_2 b} - k_2 He^{-k_2 b}) \end{aligned} \tag{4-97}$$

z=c 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &Ge^{k_2 c} + He^{-k_2 c} = Ie^{ik_1 c} + Je^{-ik_1 c} \\ &\frac{1}{m_b}(k_2 Ge^{k_2 c} - k_2 He^{-k_2 c}) = \frac{1}{m_w}(ik_1 Ie^{ik_1 c} - ik_1 Je^{-ik_1 c}) \end{aligned} \tag{4-98}$$

elde edilir. Elde edilen bu denklemler matris formunda yazılırsa;

$$m_1\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=m_2\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix}\quad;\quad m_3\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix}=m_4\begin{pmatrix}E\\F\end{pmatrix}$$
$$m_5\begin{pmatrix}E\\F\end{pmatrix}=m_6\begin{pmatrix}G\\H\end{pmatrix}\quad;\quad m_7\begin{pmatrix}G\\H\end{pmatrix}=m_8\begin{pmatrix}I\\J\end{pmatrix} \qquad (4\text{-}99)$$

bulunur. Bu ifadelerdeki **m** matrisleri;

$$m_1=\begin{pmatrix}1 & 1\\ \dfrac{ik_1}{m_w} & \dfrac{-ik_1}{m_w}\end{pmatrix}\quad;\quad m_2=\begin{pmatrix}1 & 1\\ \dfrac{k_2}{m_b} & -\dfrac{k_2}{m_b}\end{pmatrix}$$
$$m_3=\begin{pmatrix}e^{k_2a} & e^{-k_2a}\\ \dfrac{k_2e^{k_2a}}{m_b} & -\dfrac{k_2e^{-k_2a}}{m_b}\end{pmatrix}\quad;\quad m_4=\begin{pmatrix}e^{ik_1a} & e^{-ik_1a}\\ \dfrac{ik_1e^{ik_1a}}{m_w} & -\dfrac{ik_1e^{-ik_1a}}{m_w}\end{pmatrix}$$
$$m_5=\begin{pmatrix}e^{ik_1b} & e^{-ik_1b}\\ \dfrac{ik_1e^{ik_1b}}{m_w} & -\dfrac{ik_1e^{-ik_1b}}{m_w}\end{pmatrix}\quad;\quad m_6=\begin{pmatrix}e^{k_2b} & e^{-k_2b}\\ \dfrac{k_2e^{k_2b}}{m_b} & -\dfrac{k_2e^{-k_2b}}{m_b}\end{pmatrix}$$
$$m_7=\begin{pmatrix}e^{k_2c} & e^{-k_2c}\\ \dfrac{k_2e^{k_2c}}{m_b} & -\dfrac{k_2e^{-k_2c}}{m_b}\end{pmatrix}\quad;\quad m_8=\begin{pmatrix}e^{ik_1c} & e^{-ik_1c}\\ \dfrac{ik_1e^{ik_1c}}{m_w} & -\dfrac{ik_1e^{-ik_1c}}{m_w}\end{pmatrix} \qquad (4\text{-}100)$$

biçiminde tanımlanır.

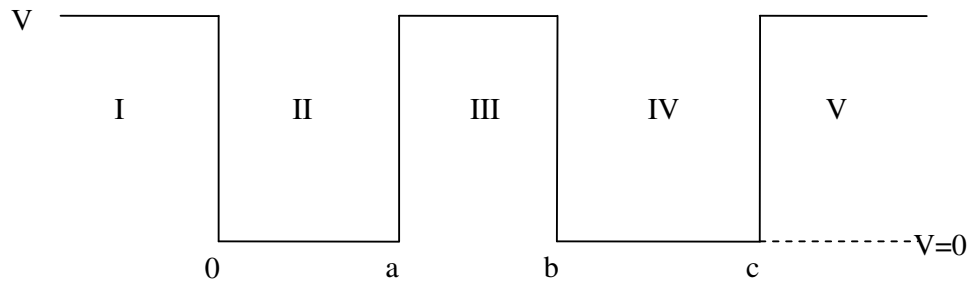
Transfer matris tekniğinden hatırlanacağı gibi, ilk ve son dalga fonksiyonlarına ait katsayılar birbirine bağlanarak.

$$\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=m_1^{-1}m_2m_3^{-1}m_4m_5^{-1}m_6m_7^{-1}m_8\begin{pmatrix}I\\J\end{pmatrix} \qquad (4\text{-}101)$$

biçiminde yazılır.

4.5. Simetrik Çift Kuyu Durumu

V_0 yüksekliğinde simetrik çift kuyu;



Şekil 4-12: Simetrik Çift Kuyu

biçiminde verilmiş olsun. I. bölgede ψ_1, II. bölgede ψ_2, III. bölgede ψ_3, IV bölgede ψ_4 ve 5. bölgede ψ_5 dalga fonksiyonlarını;

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= Ae^{k_2 z} + Be^{-k_2 z} \text{..... } z<0 \\
\Psi_2 &= C\sin k_1 z + D\cos k_1 z \text{..... } 0<z<a \\
\Psi_3 &= Fe^{k_2 z} + Ge^{-k_2 z} \text{..... } a<z<b \\
\Psi_4 &= H\sin k_1 z + I\cos k_1 z \text{..... } b<z<c \\
\psi_5 &= Je^{k_2 z} + Ke^{-k_2 z} \text{.....} c < z
\end{aligned} \tag{4-102}$$

olarak yazabiliriz. Bu ifadelerdeki k_1 ve k_2 dalga vektörleri;

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V-E)}{\hbar^2}} \tag{4-103}$$

dir. **z=0, a, b, c** ara yüzeylerinde dalga fonksiyonu ve türevlerinin sürekliliği şartı göz önüne alınacak olursa;

z=0 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned}
&A + B = D \\
&\frac{1}{m_b}(k_2 A - k_2 B) = \frac{1}{m_w} k_1 C
\end{aligned} \tag{4-104}$$

z=a 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned}
&C\sin k_1 a + D\cos k_1 a = Fe^{k_2 a} + Ge^{-k_2 a} \\
&\frac{1}{m_w}(k_1 C\cos k_1 a - k_1 D\sin k_1 a) = \frac{1}{m_b}(k_2 Fe^{k_2 a} - k_2 Ge^{-k_2 a})
\end{aligned} \tag{4-105}$$

z=b 'de; süreklilik şartına göre;

$$Fe^{k_2 b} + Ge^{-k_2 b} = H \sin k_1 b + I \cos k_1 b$$
$$\frac{1}{m_b}(k_2 Fe^{k_2 b} - k_2 Ge^{-k_2 b}) = \frac{1}{m_w}(k_1 H \cos k_1 b - k_1 I \sin k_1 b) \tag{4-106}$$

z=c 'de; süreklilik şartına göre;

$$H \sin k_1 c + I \cos k_1 c = Je^{k_2 c} + Ke^{-k_2 c}$$
$$\frac{1}{m_w}(k_1 H \cos k_1 c - k_1 I \sin k_1 c) = \frac{1}{m_b}(k_2 Je^{k_2 c} - k_2 Ke^{-k_2 c}) \tag{4-107}$$

ifadeleri elde edilir.

$$m_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad ; \quad m_3 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = m_4 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$
$$m_5 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = m_6 \begin{pmatrix} H \\ I \end{pmatrix} \quad ; \quad m_7 \begin{pmatrix} H \\ I \end{pmatrix} = m_8 \begin{pmatrix} J \\ K \end{pmatrix} \tag{4-108}$$

yazılabilir. Bu denklemlerden;

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1} m_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = m_3^{-1} m_4 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = m_5^{-1} m_6 \begin{pmatrix} H \\ I \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} H \\ I \end{pmatrix} = m_7^{-1} m_8 \begin{pmatrix} J \\ K \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1} m_2 m_3^{-1} m_4 m_5^{-1} m_6 m_7^{-1} m_8 \begin{pmatrix} J \\ K \end{pmatrix} \tag{4-109}$$

eşitlikleri elde edilir.

2x2 'lik tüm **M** matrislerinin çarpımı sonucu, yine **2x2** 'lik bir matris elde edilir. Dolayısıyla;

$$M = m_1^{-1} m_2 m_3^{-1} m_4 m_5^{-1} m_6 m_7^{-1} m_8 \tag{4-110}$$

tanımlanırsa;

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} J \\ K \end{pmatrix} \tag{4-111}$$

$$m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_2}{m_b} & -\frac{k_2}{m_b} \end{pmatrix} \;;\; m_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{k_1}{m_w} & 0 \end{pmatrix}$$

$$m_3 = \begin{pmatrix} \sin k_1 a & \cos k_1 a \\ \frac{k_1 \cos k_1 a}{m_w} & -\frac{k_1 \sin k_1 a}{m_w} \end{pmatrix} \;;\; m_4 = \begin{pmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \frac{1}{m_b} k_2 e^{k_2 a} & -\frac{1}{m_b} k_2 e^{-k_2 a} \end{pmatrix}$$

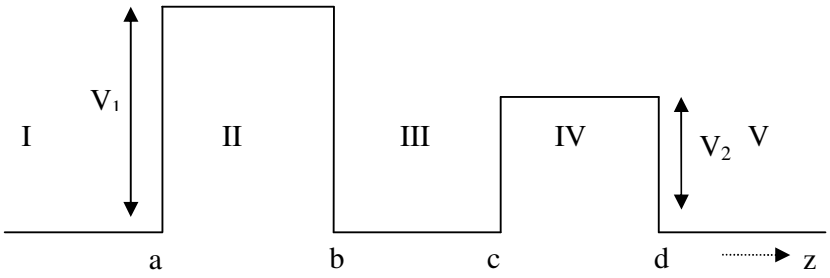
$$m_5 = \begin{pmatrix} e^{k_2 b} & e^{-k_2 b} \\ \frac{k_2 e^{k_2 b}}{m_b} & -\frac{k_2 e^{-k_2 b}}{m_b} \end{pmatrix} \;;\; m_6 = \begin{pmatrix} \sin k_1 b & \cos k_1 b \\ \frac{k_1 \cos k_1 b}{m_w} & -\frac{k_1 \sin k_1 b}{m_w} \end{pmatrix}$$

$$m_7 = \begin{pmatrix} \sin k_1 c & \cos k_1 c \\ \frac{k_1 \cos k_1 c}{m_w} & \frac{k_1 \sin k_1 c}{m_w} \end{pmatrix}; m_8 = \begin{pmatrix} e^{k_2 c} & e^{-k_2 c} \\ \frac{k_2 e^{k_2 c}}{m_b} & \frac{k_2 e^{-k_2 c}}{b_b} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}112)$$

elde edilir.

4.6. Asimetrik Çift Engel Durumu

Farklı potansiyel yüksekliğine sahip bir çift engel yapıyı inceleyelim



Şekil 4-13: Asimetrik Çift Engel

I, II, III, IV ve V bölgelerindeki dalga fonksiyonları sırasıyla;

$$\Psi_1 = Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \text{..... z<a}$$
$$\Psi_2 = Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \text{..... a<z<b}$$
$$\Psi_3 = F\sin k_1 z + G\cos k_1 z \text{ ..... b<z<c}$$
$$\Psi_4 = He^{k_3 z} + Ie^{-k_3 z} \text{..... c<z<d} \qquad (4\text{-}113)$$
$$\Psi_5 = Je^{ik_1 z} + Ke^{-ik_1 z} \text{..... d<z}$$

şeklindedir. k_1; 1, 3 ve 5 bölgelerinin dalga vektörü, k_2 2. bölgenin dalga vektörü ve k_3 4. bölgenin dalga vektörüdür.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V_1 - E)}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m_b (V_2 - E)}{\hbar^2}} \tag{4-114}$$

z=a 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} & Ae^{ik_1 a} + Be^{-ik_1 a} = Ce^{k_2 a} + De^{-k_2 a} \\ & \frac{1}{m_w}(ik_1 Ae^{ik_1 a} - ik_1 Be^{-ik_1 a}) = \frac{1}{m_b}(k_2 Ce^{k_2 a} - k_2 De^{-k_2 a}) \end{aligned} \tag{4-115}$$

z=b 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} & Ce^{k_2 b} + De^{-k_2 b} = F\sin k_1 b + G\cos k_1 b \\ & \frac{1}{m_b}(k_2 Ce^{k_2 b} - k_2 De^{-k_2 b}) = \frac{1}{m_w}(k_1 F\cos k_1 b - k_1 G\sin k_1 b) \end{aligned} \tag{4-116}$$

z=c 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} & F\sin k_1 c + G\cos k_1 c = He^{k_3 c} + Ie^{-k_3 c} \\ & \frac{1}{m_w}(k_1 F\cos k_1 c - k_1 G\sin k_1 c) = \frac{1}{m_b}(k_3 He^{k_3 c} - k_3 Ie^{-k_3 c}) \end{aligned} \tag{4-117}$$

z=d 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} & He^{k_3 d} + Ie^{-k_3 d} = Je^{ik_1 d} + Ke^{-ik_1 d} \\ & \frac{1}{m_b}(k_3 He^{k_3 d} - k_3 Ie^{-k_3 d}) = \frac{1}{m_w}(ik_1 Je^{ik_1 d} - ik_1 Ke^{-ik_1 d}) \end{aligned} \tag{4-118}$$

ifadeleri yazılabilir. Bu denklemleri matris formunda yazarsak;

$$\begin{aligned} & m_1\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_2\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad ; \quad m_3\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = m_4\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \\ & m_5\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = m_6\begin{pmatrix} H \\ I \end{pmatrix} \quad ; \quad m_7\begin{pmatrix} H \\ I \end{pmatrix} = m_8\begin{pmatrix} J \\ K \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4-119}$$

olur. Buradan da m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, m_7 ve m_8 matrislerini

$$m_1=\begin{pmatrix} e^{ik_1a} & e^{-ik_1a} \\ \dfrac{ik_1e^{ik_1a}}{m_w} & -\dfrac{ik_1e^{-ik_1a}}{m_w} \end{pmatrix} \;;\; m_2=\begin{pmatrix} e^{k_2a} & e^{-k_2a} \\ \dfrac{k_2e^{k_2a}}{m_b} & -\dfrac{k_2e^{-k_2a}}{m_b} \end{pmatrix}$$

$$m_3=\begin{pmatrix} e^{k_2b} & e^{-k_2b} \\ \dfrac{k_2e^{k_2b}}{m_b} & -\dfrac{k_2e^{-k_2b}}{m_b} \end{pmatrix} \;;\; m_4=\begin{pmatrix} \sin k_1b & \cos k_1b \\ \dfrac{k_1\cos k_1b}{m_w} & -\dfrac{k_1\sin k_1b}{m_w} \end{pmatrix}$$

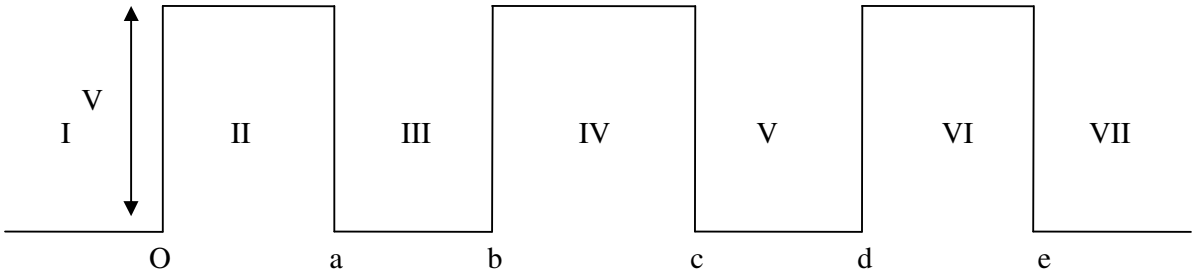
$$m_5=\begin{pmatrix} \sin k_1c & \cos k_1c \\ \dfrac{k_1\cos k_1c}{m_w} & -\dfrac{k_1\sin k_1c}{m_w} \end{pmatrix} \;;\; m_6=\begin{pmatrix} e^{k_3c} & e^{-k_3c} \\ \dfrac{k_3e^{k_3c}}{m_b} & -\dfrac{k_3e^{-k_3c}}{m_b} \end{pmatrix}$$

$$m_7=\begin{pmatrix} e^{k_3d} & e^{-k_3d} \\ \dfrac{k_3e^{k_3d}}{m_b} & -\dfrac{k_3e^{-k_3d}}{m_b} \end{pmatrix} \;;\; m_8=\begin{pmatrix} e^{ik_1d} & e^{-ik_1d} \\ \dfrac{ik_1e^{ik_1d}}{m_w} & -\dfrac{ik_1e^{-ik_1d}}{m_w} \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}120)$$

biçiminde buluruz.

4.7. Simetrik Üçlü Engel Durumu

V yüksekliğinde simetrik üçlü yapıyı inceleyelim



Şekil 4-14: Simetrik Üçlü Engel

I. bölgede ψ_1, II. bölgede ψ_2, III. bölgede ψ_3, IV bölgede ψ_4, V. bölgede ψ_5, VI bölgede ψ_6 ve VII. bölgede ψ_7 dalga fonksiyonları vardır.

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= Ae^{ik_1z}+Be^{-ik_1z} \text{..... z<0} \\
\Psi_2 &= Ce^{k_2z}+De^{-k_2z} \text{..... 0<z<a} \\
\Psi_3 &= F\sin k_1z+G\cos k_1z \text{ ..... a<z<b} \\
\Psi_4 &= He^{k_2z}+Ie^{-k_2z} \text{..... b<z<c} \\
\Psi_5 &= J\sin k_1z+K\cos k_1z \text{..... c<z<d} \\
\Psi_6 &= Le^{k_2z}+Me^{-k_2z} \text{..... d<z<e} \\
\Psi_7 &= Ne^{ik_1z}+Oe^{-ik_1z} \text{..... e<z}
\end{aligned} \qquad (4\text{-}121)$$

$k_{1;}$ I, III, V ve VII bölgelerinin dalga vektörüdür. k_2 ise II, IV, VI bölgelerinin dalga vektörüdür.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}}\,; k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V-E)}{\hbar^2}} \tag{4-122}$$

z=0 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &A + B = C + D \\ &\frac{1}{m_w}(ik_1 A - ik_1 B) = \frac{1}{m_b}(k_2 C - k_2 D) \end{aligned} \tag{4-123}$$

z=a 'da; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &Ce^{k_2 a} + De^{-k_2 a} = F\sin k_1 a + G\cos k_1 a \\ &\frac{1}{m_b}(k_2 Ce^{k_2 a} - k_2 De^{-k_2 a}) = \frac{1}{m_w}(k_1 F\cos k_1 a - k_1 G\sin k_1 a) \end{aligned} \tag{4-124}$$

z=b 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &F\sin k_1 b + G\cos k_1 b = He^{k_2 b} + Ie^{-k_2 b} \\ &\frac{1}{m_w}(k_1 F\cos k_1 b - k_1 G\sin k_1 b) = \frac{1}{m_b}(k_2 He^{k_2 b} - k_2 Ie^{-k_2 b}) \end{aligned} \tag{4-125}$$

z=c 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &He^{k_2 c} + Ie^{-k_2 c} = J\sin k_1 c + K\cos k_1 c \\ &\frac{1}{m_b}(k_2 He^{k_2 c} - k_2 Ie^{-k_2 c}) = \frac{1}{m_w}(k_1 J\cos k_1 c - k_1 K\sin k_1 c) \end{aligned} \tag{4-126}$$

z=d 'de; süreklilik şartına göre;

$$\begin{aligned} &J\sin k_1 d + K\cos k_1 d = Le^{k_2 d} + Me^{-k_2 d} \\ &\frac{1}{m_w}(k_1 J\cos k_1 d - k_1 K\sin k_1 d) = \frac{1}{m_b}(k_2 Le^{k_2 d} - k_2 Me^{-k_2 d}) \end{aligned} \tag{4-127}$$

z= e 'de; süreklilik şartına göre;

$$
\begin{aligned}
&Le^{k_2 e} + Me^{-k_2 e} = Ne^{ik_1 e} + Oe^{-ik_1 e} \\
&\frac{1}{m_b}(k_2 Le^{k_2 e} - k_2 Me^{-k_2 e}) = \frac{1}{m_w}(ik_1 Ne^{ik_1 e} - ik_1 Oe^{-ik_1 e})
\end{aligned}
\tag{4-128}
$$

elde edilir. Bu denklemlerden m matrislerini buluruz.

$$
m_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \dfrac{ik_1}{m_w} & -\dfrac{ik_1}{m_w} \end{bmatrix}, \qquad
m_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \dfrac{k_2}{m_b} & -\dfrac{k_2}{m_b} \end{bmatrix}
$$

$$
m_3 = \begin{bmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 a}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 a}}{m_b} \end{bmatrix}, \qquad
m_4 = \begin{bmatrix} \sin k_1 a & \cos k_1 a \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 a}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 a}{m_w} \end{bmatrix}
$$

$$
m_5 = \begin{bmatrix} \sin k_1 b & \cos k_1 b \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 b}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 b}{m_w} \end{bmatrix} \qquad
m_6 = \begin{bmatrix} e^{k_2 b} & e^{-k_2 b} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 b}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 b}}{m_b} \end{bmatrix}
$$

$$
m_7 = \begin{bmatrix} e^{k_2 c} & e^{-k_2 c} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 c}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 c}}{m_b} \end{bmatrix} \qquad
m_8 = \begin{bmatrix} \sin k_1 c & \cos k_1 c \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 c}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 c}{m_w} \end{bmatrix}
$$

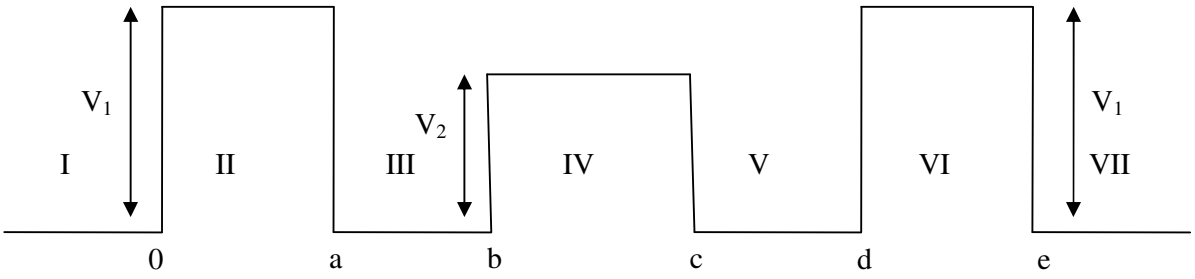
$$
m_9 = \begin{bmatrix} \sin k_1 d & \cos k_1 d \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 d}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 d}{m_w} \end{bmatrix} \qquad
m_{10} = \begin{bmatrix} e^{k_2 d} & e^{-k_2 d} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 d}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 d}}{m_b} \end{bmatrix}
$$

$$
m_{11} = \begin{bmatrix} e^{k_2 e} & e^{-k_2 e} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 e}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 e}}{m_b} \end{bmatrix} \qquad
m_{12} = \begin{bmatrix} e^{ik_1 e} & e^{-ik_1 e} \\ \dfrac{ik_1 e^{k_1 e}}{m_w} & -\dfrac{ik_1 e^{-ik_1 e}}{m_w} \end{bmatrix}
\tag{4-129}
$$

$$
\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m_1^{-1} m_2 m_3^{-1} m_4 m_5^{-1} m_6 m_7^{-1} m_8 m_9^{-1} m_{10} m_{11}^{-1} m_{12} \begin{pmatrix} N \\ O \end{pmatrix} \\
&\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} N \\ O \end{pmatrix} \\
&M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{4-130}
$$

4.8. Asimetrik Üçlü Engel Durumu

Farklı potansiyel yüksekliğine sahip üçlü engel yapıyı inceleyelim:



Şekil 4-15: Asimetrik Üçlü Engel

Dalga fonsiyonları sırasıyla ψ_1, ψ_2, ψ_3,ψ_4, ψ_5, ψ_6 ve ψ_7 dir.

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z} \text{..... z<0} \\
\Psi_2 &= Ce^{k_2 z} + De^{-k_2 z} \text{..... 0<z<a} \\
\Psi_3 &= F\sin k_1 z + G\cos k_1 z \text{ ..... a<z<b} \\
\Psi_4 &= He^{k_3 z} + Ie^{-k_3 z} \text{..... b<z<c} \\
\Psi_5 &= J\sin k_1 z + K\cos k_1 z \text{..... c<z<d} \\
\Psi_6 &= Le^{k_2 z} + Me^{-k_2 z} \text{..... d<z<e} \\
\Psi_7 &= Ne^{ik_1 z} + Oe^{-ik_1 z} \text{..... e<z}
\end{aligned} \tag{4-131}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_b (V_1 - E)}{\hbar^2}} \quad ; \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m_b (V_2 - E)}{\hbar^2}} \tag{4-133}$$

k_1; I, III, V, VII bölgelerinin dalga vektörü, k_2; II ve VI bölgelerinin dalga vektörü ve k_3, III. bölgenin dalga vektörüdür.

z=0 'da; süreklilik şartına göre

$$\begin{aligned}
&A + B = C + D \\
&\frac{1}{m_w}(ik_1 A - ik_1 B) = \frac{1}{m_b}(k_2 C - k_2 D)
\end{aligned} \tag{4-134}$$

z=a 'da; süreklilik şartına göre

$$\begin{aligned}
&Ce^{k_2 a} + De^{-k_2 a} = F\sin k_1 a + G\cos k_1 a \\
&\frac{1}{m_b}(k_2 Ce^{k_2 a} - k_2 De^{-k_2 a}) = \frac{1}{m_w}(k_1 F\cos k_1 a - k_1 G\sin k_1 a)
\end{aligned} \tag{4-135}$$

z=b 'de; süreklilik şartına göre;

$$F\sin k_1 b + G\cos k_1 b = He^{k_3 b} + Ie^{-k_3 b}$$
$$\frac{1}{m_w}(k_1 F\cos k_1 b - k_1 G\sin k_1 b) = \frac{1}{m_b}(k_3 He^{k_3 b} - k_3 Ie^{-k_3 b}) \quad (4\text{-}136)$$

z=c 'de; süreklilik şartına göre;

$$He^{k_3 c} + Ie^{-k_3 c} = J\sin k_1 c + K\cos k_1 c$$
$$\frac{1}{m_b}(k_3 He^{k_3 c} - k_3 Ie^{-k_3 c}) = \frac{1}{m_w}(k_1 J\cos k_1 c - k_1 K\sin k_1 c) \quad (4\text{-}137)$$

z=d 'de; süreklilik şartına göre;

$$J\sin k_1 d + K\cos k_1 d = Le^{k_2 d} + Me^{-k_2 d}$$
$$\frac{1}{m_w}(k_1 J\cos k_1 d - k_1 K\sin k_1 d) = \frac{1}{m_b}(k_2 Le^{k_2 d} - k_2 Me^{-k_2 d}) \quad (4\text{-}138)$$

z= e 'de; süreklilik şartına göre;

$$Le^{k_2 e} + Me^{-k_2 e} = Ne^{ik_1 e} + Oe^{-ik_1 e}$$
$$\frac{1}{m_b}(k_2 Le^{k_2 e} - k_2 Me^{-k_2 e}) = \frac{1}{m_w}(ik_1 Ne^{ik_1 e} - ik_1 Oe^{-ik_1 e}) \quad (4\text{-}139)$$

yazılır. Bu denklemler matris formunda

$$m_1\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix} = m_2\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix} \quad ; \quad m_3\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix} = m_4\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}$$
$$m_5\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix} = m_6\begin{pmatrix}H\\I\end{pmatrix} \quad ; \quad m_7\begin{pmatrix}H\\I\end{pmatrix} = m_8\begin{pmatrix}J\\K\end{pmatrix}$$
$$m_9\begin{pmatrix}J\\K\end{pmatrix} = m_{10}\begin{pmatrix}L\\M\end{pmatrix} \quad ; \quad m_{11}\begin{pmatrix}L\\M\end{pmatrix} = m_{12}\begin{pmatrix}N\\O\end{pmatrix} \quad (4\text{-}140)$$

biçiminde yazılır. Sonuç olarak m matrisleri;

$$
m_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \dfrac{ik_1}{m_w} & \dfrac{-ik_1}{m_w} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathrm{m}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \dfrac{k_2}{m_b} & -\dfrac{k_2}{m_b} \end{pmatrix}
$$

$$
m_3 = \begin{pmatrix} e^{k_2 a} & e^{-k_2 a} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 a}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 a}}{m_b} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathrm{m}_4 = \begin{pmatrix} \sin k_1 a & \cos k_1 a \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 a}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 a}{m_w} \end{pmatrix}
$$

$$
m_5 = \begin{pmatrix} \sin k_1 b & \cos k_1 b \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 b}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 b}{m_w} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathrm{m}_6 = \begin{pmatrix} e^{k_3 b} & e^{-k_3 b} \\ \dfrac{k_3 e^{k_3 b}}{m_b} & -\dfrac{k_3 e^{-k_3 b}}{m_b} \end{pmatrix} \qquad \text{(4-141)}
$$

$$
m_7 = \begin{pmatrix} e^{k_3 c} & e^{-k_3 c} \\ \dfrac{k_3 e^{k_3 c}}{m_b} & -\dfrac{k_3 e^{-k_3 c}}{m_b} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathrm{m}_8 = \begin{pmatrix} \sin k_1 c & \cos k_1 c \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 c}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 c}{m_w} \end{pmatrix}
$$

$$
m_9 = \begin{pmatrix} \sin k_1 d & \cos k_1 d \\ \dfrac{k_1 \cos k_1 d}{m_w} & -\dfrac{k_1 \sin k_1 d}{m_w} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathrm{m}_{10} = \begin{pmatrix} e^{k_2 d} & e^{-k_2 d} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 d}}{m_b} & -\dfrac{k_2 e^{-k_2 d}}{m_b} \end{pmatrix}
$$

$$
m_{11} = \begin{pmatrix} e^{k_2 e} & e^{-k_2 e} \\ \dfrac{k_2 e^{k_2 e}}{m_b} & \dfrac{-k_2 e^{-k_2 e}}{m_b} \end{pmatrix}; \quad m_{12} = \begin{pmatrix} e^{ik_1 e} & e^{-ik_1 e} \\ \dfrac{ik_1 e^{ik_1 e}}{m_w} & \dfrac{-ik_1 e^{-ik_1 e}}{m_w} \end{pmatrix}
$$

olarak elde edilir**.**

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Kuantum nanoyapılar günümüzde teknolojinin hemen her alanında çok yaygın şekilde kullanılmaktadır. Bu yapılara dayalı aygıtların nitelik ve performansının geliştirilmesi, heteroyapılara ilişkin temel fiziksel bilginin ve materyal karakterizasyon tekniklerinin iyileştirilmesine sıkı biçimde bağlıdır. Nano ölçekli yapılar üzerindeki çalışmalar, bir yandan mevcut malzemeler kullanılarak değişik amaçlara uygun farklı teknolojik cihazların üretim ve karakterizasyonuna, diğer yandan ise bu yapılarda geçerli temel fiziksel süreçlerin daha iyi anlaşılmasına yöneliktir. Teknolojideki yaygın kullanımlarına uygun olarak söz konusu yapılar üzerindeki teorik ve deneysel çalışmalar ağırlıklı olarak optik ve elektriksel özelliklerin araştırılması üzerinde yoğunlaşmaktadır.

Bu çalışmada, kuantum nanoyapılar ve özellikle de kuantum kuyu yapıların özellikleri incelenmiştir. Heteroyapılarda taşıyıcıların dalga fonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini belirlemek maksadıyla zamandan bağımsız tek boyutlu Schrödinger denkleminin sayısal olarak çözülmesi gerekmektedir. Bunun için kullanılan yöntemler; transfer matris yöntemi, doğrudan analitik çözüm yöntemi ve sayısal integrasyon metodlarıdır. Bu yöntemlerden transfer matris tekniği özellikle belirli ara yüzeylere ve sınır durumlarına sahip kuantum kuyularından enerji özdeğerlerinin belirlenmesinde kullanılır. Yöntem temelde keskin arayüzeye sahip yapılarda dalga fonksiyonlarının ve türevlerinin ilgili ara yüzeylerde ve sınırlarda sürekliliği şartına dayanır. Bu amaçla incelenen yapı geometrik açıdan potansiyel enerji fonksiyonunda keskin değişimlerin olduğu noktalar temel alınarak belirli bağımsız bölgelere ayrılır. Bu bölgelerin özfonksiyonları belirlenir ve sınırlardaki süreklilik şartına uyularak matris eşitliği oluşturulur. Bizde çeşitli heteroyapılarda bu eşitliği oluşturduk. Bu eşitliğin çözümü ise enerji özdeğerlerini verir.

KAYNAKÇA

Abramowitz and Stegun, "Handbook of Mathematical Function", Dover, 1972, pp 449

Berggren, K. F., Thornton, J. J., Newson, D. J. and Pepper, M., 1986, Phys. Rev. Lett. 57: 1769 – 1772

Bukowski, T. J. and Simmons, J. H., 2002, Quantum dot research: Current state and future prospects. Critical Reviews in Solid State and Material Sciences 27: 119-142.

Chang, L. L., Esaki, L. and Tsu, R., 1974, Resonant Tunneling in semiconductor double barriers, Appl. Phys. Lett. 24: 593-595.

Chemla, D. S., 1993, Optics of Nanostructures, Physics Today 56: 22-23.

Corcoran, E. and Zorpette, G., 1997, Diminishing dimensions. Scientific American (Special Issue Solid State) 8: 25-33.

Dingle, R., Wienmann, W. and Henry, C. H., 1974, Phys. Rev. Lett. 33: 827-830.

Esaki, L. and Chang, L. L., 1974, Phs. Rev. Lett. 33: 495-498.

Forman Acton, "Numerical Methods That Work", Harper and Rao, New York

Gammon, D., 2000, Semiconductor physics. Electrons in artificial atoms. Nature 405: 899-900.

Hansen, W. Horst, M., Kotthaus, J. P. and Merkt, U., 1987, Phys. Rev. Lett. 58: 2586-2589.

John Wiley and Sons, "See for instance Sze, "Physies of Semiconductor Devices", Newyork, 1981

Johson, N. F., 1995, Quantum Dots: few-body, low dimensional systems. Journal of physics: Condensed. Matters. 7: 965-989.

Kastner, M. A., 1993, Artificial atoms, Physics Today 56: 24-31.

Manuel, P. and Chang, L. L., 1976, Phys. Rev. Lett. 37: 1701-1704.

Mc Euen, P. L. 1997, Artificial atoms: New boxes for electrons Science 278: 1729-1730.

Mendez, E. E., Esahi, L. Wang, W. I., 1986, Phys. Rev. B 33: 2893-2896.

Miller, R.C. and Tsang, W. T., 1980, Phys. Rev. B 21: 1569-1575.

Pinczuk, A., Störmer, H. L., Dingle, R. and Wiegmann, Q., 1979, Solid State Communications 32: 1001-1003.

Reed, M. A., 1993, Kuantum Dots, Scientific American 268: 118-123.

Reed, M. A., 1993, Kuantum Dots, Scientific American Jounary 98-103.

Smith, T. P., Arnot, H., Hong, J. M., Knoedler, C. M., Laux, S. E. and Schmid, H., 1987, Phys. Rev. Lett. 59: 2802-2805

Stephen P. Wilson, Duncan W.E. Allsopp and Christopher G. Marton, "Apphication of an efficient algorithan for solving the one-band effective mass equation self-consistentely in the modeling of some low-dimensional structure devices, "Int. J. of Num Model Elec. Networtks, Devices and fields, Vol. s, 1994, pp 23-29.

Sugg, A.R. Leburton, J. -P. C. Modeling of modulation- doped multiple -quantum- well structures inapplied electric fields using the transfer –matrix technique IEEE JOURNAL OF QUANTUM ELECTRONİCS, VOL. 27, NO. 2, (1991).

Wayne W. Lui and Massao Fukuma, "Exact solution of the Schrödinger Equation across an arbitrary one-dimenciond piecewise-linear potential barrier", J. Appl. Phys. 60 (5, 1986, pg 1555.

Wortmann, D., H. İshida, and S. Blügel, ""Ab initio Green-function formulation of the transfer matrix; Application to complex band structures" Phys. Rev. B 65, 165103 (2002).

Yuji Ando and Tomohiro Itoh, "Calculation of tansmission tunneling current across arbitrary potentinal barriers", J. Appl. Phys. 61 (4), 1987, pp 1497.